

Superoperatormethoden in der Vielteilchenphysik

Inaugural-Dissertation

**zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Freien Universität Berlin**

vorgelegt von

Jürgen Bosse

aus Gleidingen/Hannover

1972

Superoperatormethoden in der Vielteilchenphysik

**Inaugural-Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Freien Universität Berlin**

**vorgelegt von
Jürgen Bosse
aus Gleidingen/Hannover**



1. Gutachter: Prof. Dr. H. Gabriel
2. Gutachter: Prof. Dr. H. Stenschke

Tag der letzten mündlichen Prüfung: 18. Juli 1972

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
2. Der Korrelationsoperator	4
3. Dispersions-Relationen	6
4. Verallgemeinertes Dissipations-Fluktuations-Theorem	9
5. Bewegungsgleichungen	11
6. Ist die Einführung der kausalen Green's Funktion unnötig?	13
7. Dyson-Gleichung	16
8. Modifizierte Dyson-Gleichung	20
9. Kettenbruch-Entwicklung des Propagators (Green's Funktion)	23
10. Hartree-Fock-Approximation (HFA)	25
11. Erweiterter Satz von Operatoren (Paarapproximation)	29
12. Supraleitung und Superfluidität	37
13. Magnetismus: Ising- und Heisenberg-Modell	46
14. Zusammenfassung	56
A1. Superoperatoren und Zweite Quantisierung	59
A2. Superoperatoren im Magnetismus	69
A3. Superoperatoren und Lineare Antwort-Theorie	74
A4. Bewegungsgleichungen für einen Satz von Operatoren	77
A5. Fourierreihen für quasi-periodische Funktionen	81
Literaturverzeichnis	82

1. EINLEITUNG

Physikalische Meßgrößen lassen sich quantenmechanisch durch Erwartungswerte der entsprechenden Observablen ausdrücken. Der Erwartungswert irgendeines Operators B ist durch

$$(1.1) \quad \langle B \rangle = \text{Tr} \{ \mathcal{G} B \}$$

gegeben, wobei der statistische Operator $\mathcal{G}$ den Zustand des Systems beschreibt. Im folgenden wird immer die kanonische Form für $\mathcal{G}$ gewählt:

$$(1.2) \quad \mathcal{G} = e^{-\beta H} / \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \} \quad , \quad \beta = (kT)^{-1} .$$

H beschreibt den Hamiltonoperator des Systems. Oft ist es vorteilhaft, mit der großkanonischen Gesamtheit zu arbeiten; in solchen Fällen verstehen wir H in (1.2) als $H' = H - \mu N$ (μ chemisches Potential, N Operator der Gesamtteilchenzahl). Beim Versuch, Erwartungswerte der Form (1.1) zu berechnen, stößt man - bei oft sehr unterschiedlichen physikalischen Fragestellungen - auf das Problem der Berechnung von Korrelationsfunktionen oder auch von Green's Funktionen. Dies soll anhand von drei Beispielen erläutert werden.

a. Übergangswahrscheinlichkeit

Berechnet man die Emissionswahrscheinlichkeit $W(\omega \vec{k} \sigma; t) = \langle P_{\omega \vec{k} \sigma} \rangle_t$ für ein γ -Quant durch einen Atomkern (das ist der Erwartungswert des Projektors $P_{\omega \vec{k} \sigma}$ auf den Zustand: "Kern im Grundniveau, $(\omega \vec{k} \sigma)$ -Quant im Strahlungsfeld"), so erhält man in der Näherung von Weisskopf und Wigner:

$$(1.3) \quad W(\omega \vec{k} \sigma; t) = \int_0^t \int_0^t d\tau d\tau' e^{i(\tau-\tau')(\omega-\omega_0) - \frac{\Gamma}{2}(\tau+\tau')} \langle V_{\vec{k}\sigma}(\tau') V_{\vec{k}\sigma}^+(\tau) \rangle .$$

Darin ist ω_0 die Energiedifferenz der beiden Kernzustände ($\hbar = 1$); Γ die Linienbreite des angeregten Kernniveaus und $V_{\vec{k}\sigma}$ der Kernanteil des Wechselwirkungsoperators mit dem Strahlungsfeld¹⁾. Die Mittelwertbildung bezieht sich nur noch auf die Zustände des Kerns und seiner Umgebung;

1) Gl.(1.3) dient als Ausgangsform für die Theorie des Mößbauer-Effekts und auch der gestörten Winkelkorrelation; siehe hierzu z.B. [24]

das Strahlungsfeld ist näherungsweise behandelt worden. Formel (1.3) zeigt, daß sich die Emissionswahrscheinlichkeit für γ -Quanten durch eine Zeit-Korrelationsfunktion vom Typ

$$(1.4) \quad K_{AB}(t, t') = \langle A(t) B^+(t') \rangle$$

ausdrücken läßt.¹⁾ Ein weiteres Beispiel bilden die

b. Erwartungswerte von Einteilchen-Operatoren.

Die Berechnung von Erwartungswerten von Einteilchen-Operatoren im Formalismus der Zweiten Quantisierung führt auf folgenden Ausdruck

$$(1.5) \quad \langle F^{(1)} \rangle = \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^3x \langle \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}) f_{\alpha'\alpha}^{(1)}(\vec{x}) \psi_{\alpha}(\vec{x}) \rangle,$$

wenn man $F^{(1)}$ in der üblichen Weise mit Hilfe der Feldoperatoren

$$(1.6) \quad \psi_{\alpha}(\vec{x}; t) = \sum_n \varphi_n(\vec{x}; \alpha) \psi_n(t) ; \quad \psi_n(t) = e^{itH} \psi_n e^{-itH}$$

ausdrückt. (Zur Symbolik vergl. Anhang A1). Gleichung (1.5) läßt sich auf die Form

$$(1.7) \quad \langle F^{(1)} \rangle = -i\eta \sum_{\alpha', \alpha} \int d^3x \lim_{\vec{x}' \rightarrow \vec{x}} \lim_{t' \rightarrow t^+} f_{\alpha'\alpha}^{(1)}(\vec{x}) G_{\alpha\alpha'}^{(c)}(\vec{x}, t; \vec{x}', t')$$

umschreiben²⁾, wo der gesuchte Erwartungswert durch die kausale Green's Funktion

$$(1.8) \quad G_{\alpha\beta}^{(c)}(\vec{x}, t; \vec{y}, t') = \frac{1}{i} \langle \mathcal{T}_{\eta} [\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) \psi_{\beta}^+(\vec{y}, t')] \rangle$$

ausgedrückt wird. Darin ist $\mathcal{T}_{\eta}$ der Wick'sche Zeitordnungsoperator:

1) Eine ganz analoge Korrelationsfunktion tritt auch in der Absorptionswahrscheinlichkeit auf.

2) Beim Grenzübergang $t' \rightarrow t$ in (1.7) soll stets $t' > t$ sein, was durch die Schreibweise $\lim_{t' \rightarrow t^+}$ zum Ausdruck gebracht wird.

$$(1.9) \quad \mathcal{T}_\eta [\psi_\alpha(\vec{x};t) \psi_\beta^\dagger(\vec{y};t')] = \begin{cases} \psi_\alpha(\vec{x};t) \psi_\beta^\dagger(\vec{y};t') & \text{für } t > t' \\ -\eta \psi_\beta^\dagger(\vec{y};t') \psi_\alpha(\vec{x};t) & \text{für } t < t' \end{cases}$$

($\eta = -1$ für Bosonen; $\eta = +1$ für Fermionen).

Bei Vielteilchenproblemen ist es vorteilhaft, die oben erwähnte großkanonische Gesamtheit bei der Mittelwertbildung zu benutzen; deshalb denke man sich in den Gleichungen (1.5) bis (1.9) die Ersetzung $H \rightarrow H - \mu N$ durchgeführt.

c. Lineare Antworttheorie

Als letztes Beispiel wird die Reaktion eines physikalischen Systems auf eine äußere (zeitabhängige) Störung betrachtet. Die äußere Störung bewirke einen Zusatzterm $V_t = a(t) A$ ($a(t)$ sei eine c -Zahl-Funktion) im Hamiltonoperator; dann erhält man für den Erwartungswert des Operators $\Delta B = B - \langle B \rangle$ in linearer Näherung bezüglich der Störung V_t (weitere Einzelheiten siehe Anhang A3):

$$(1.10) \quad \langle \Delta B \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\theta(t-\tau)}{i} \langle [\Delta B(t-\tau), \Delta A]_- \rangle a(\tau)$$

Gleichung (1.10) drückt die "lineare Antwort" eines Systems auf eine äußere Störung mit Hilfe einer retardierte Green's Funktion vom Typ

$$(1.11) \quad G_{AB}^{(r)}(t; t') = \frac{\theta(t-t')}{i} \langle [A(t), B^\dagger(t')]_\eta \rangle$$

aus. Darin bedeutet: $[A, B]_\eta = AB + \eta BA$.

Die Reihe dieser Beispiele ließe sich fortsetzen (z.B. mit der Teilchendichte-Korrelationsfunktion in der Theorie der Neutronenstreuung). Die Vielfalt der physikalischen Anwendungsgebiete hat dazu geführt, daß eine große Zahl von verschiedenen Korrelationsfunktionen und Green's Funktionen definiert wurde, deren gemeinsame Merkmale nur noch schwer wiederzuerkennen sind.

Im nächsten Kapitel sollen diese Gemeinsamkeiten herausgearbeitet werden.

2. DER KORRELATIONSOPERATOR

Korrelationsfunktionen und Green's Funktionen enthalten sowohl Information über die Dynamik als auch über die statistischen Eigenschaften eines Systems. Die Dynamik wird durch die Heisenberg-Zeitabhängigkeit der Operatoren und die Statistik durch den Dichteoperator (statistischen Operator) beschrieben. Alle oben genannten Funktionen tragen diese Informationen über ein physikalisches System. Für eine einheitliche mathematische Behandlung erweist sich der sogenannte 'Superoperator-Formalismus' als besonders geeignet.¹⁾ Im Raum $\mathcal{L}$ der linearen Operatoren $A, B, \dots$ führen wir eine unitäre Metrik durch die Beziehung

$$(2.1) \quad (A|B) = \text{Tr} \{ A^+ B \}$$

ein. Ferner betrachten wir lineare (Super-)Operatoren $\mathcal{S}, \mathcal{U}, \underline{A}, \check{B}, \dots$, die auf die Elemente $|A\rangle, |B\rangle, \dots$ des Raumes $\mathcal{L}$ wirken:

$$(2.2) \quad \mathcal{S}|A\rangle = |B\rangle, \quad (|A\rangle \in \mathcal{L}, |B\rangle \in \mathcal{L}).$$

Einige einfache Beispiele solcher (Super-)Operatoren definieren wir durch die Gleichungen²⁾

$$(2.3a) \quad \underline{A}|B\rangle = |AB\rangle \quad (2.3b) \quad \overline{A}|B\rangle = |BA\rangle$$

$$(2.3c) \quad \hat{A}|B\rangle = |[A, B]_- \rangle \quad (2.3d) \quad \check{A}|B\rangle = |[A, B]_+ \rangle.$$

Um alle vier in (2.3) aufgeführten Superoperatoren gemeinsam behandeln zu können, setzen wir noch

$$(2.4) \quad \boxed{\overset{(m,n)}{A} = m \underline{A} + n \overline{A} \quad ; (m, n = 0, \pm 1)}$$

woraus sich obige Operatoren durch spezielle Wahl von (m, n) ergeben.

1) Diese Methode hat sich u.a. bei der Beschreibung eines quantenmechanischen Systems, das sich in Wechselwirkung mit einer als Wärmebad wirkenden Umgebung befindet, als sehr erfolgreich erwiesen. (Relaxations-Theorie) [1], [2], [3], [4].

2) Weitere Einzelheiten über die Superoperator-Methode finden sich in [4], [25].

Die wohlbekannte und wichtige Formel

$$(2.5) \quad |e^{mA} C e^{nA}\rangle = e^{A^{(m,n)}} |C\rangle$$

läßt sich sehr einfach herleiten, wenn man von der Vertauschbarkeit der Superoperatoren $\underline{A}$ und $\bar{A}$ Gebrauch macht [25]¹⁾. Ferner gilt für eine Korrelationsfunktion die Darstellung

$$(2.6) \quad \langle [A, B^+]_{\eta} \rangle = (A^+ | \hat{g}^{(\eta,1)} | B^+) ; \quad \eta = \pm 1 ,$$

wie man unter Verwendung der zyklischen Vertauschbarkeit unter der Spur leicht verifiziert.

Wir definieren nun einen Korrelationsoperator

$$(2.7) \quad \tilde{K}^{(m,n)}(t) = e^{-it\hat{H}} \hat{g}^{(m,n)}$$

und einen Green's Operator²⁾ durch:

$$(2.8) \quad \tilde{K}_s^{(m,n)}(t) = -is\theta(st)\tilde{K}^{(m,n)}(t) ; \quad (s=\pm 1) :$$

Mit Hilfe dieser beiden Operatoren, die sich nur durch die im Green's Operator hinzugefügte Sprungfunktion $\theta(\pm t)$ unterscheiden, lassen sich alle bisher betrachteten Korrelationsfunktionen und Green's Funktionen darstellen. Sie ergeben sich als (Super-)Matrixelemente in der Form:

$$(2.9) \quad (A^+ | \tilde{K}_s^{(m,n)}(t-t') | B^+) = \frac{s\theta(st)}{i} \{ n \langle A(t) B^+(t') \rangle + m \langle B^+(t') A(t) \rangle \} .$$

Einige besonders häufig vorkommende Operatoren kennzeichnen wir durch besondere Symbole:

$$(2.10) \quad \begin{aligned} \mathcal{G}_r(t) &\equiv \tilde{K}_1^{(\eta,1)}(t) && \text{retardierter Green's Operator,} \\ \mathcal{G}_a(t) &\equiv \tilde{K}_{-1}^{(\eta,1)}(t) && \text{avancierter Green's Operator,} \end{aligned}$$

¹⁾ Allgemein ist $[A, \bar{B}]_- = 0$ für jedes A, B .

²⁾ Diese Bezeichnungsweise wurde gewählt, weil sich mit Hilfe von (2.8) speziell die Green's Funktionen - retardiert, avanciert und kausal - darstellen lassen.

$$\eta_c(t) \equiv \tilde{R}_1^{(0,1)}(t) + \tilde{R}_{-1}^{(1,0)}(t) \quad \text{kausaler Green's Operator.}$$

Tabelle 1 auf der nächsten Seite gibt eine Übersicht über die wichtigsten Korrelations- und Green's Operatoren und ihre (Super-)Matrixelemente, d.h. die entsprechenden Funktionen. (Zur Bedeutung der 3. Spalte in Tab. 1 vgl. Anhang A⁴).

Im nächsten Kapitel werden die Fouriertransformierten der Operatoren (2.7) und (2.8) untersucht.

3. DISPERSIONS-RELATIONEN

Mit Hilfe der Integraldarstellung der Sprungfunktion,

$$(3.1) \quad s \theta(st) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{i\omega t}}{\omega - si\epsilon} ; (s = \pm 1),$$

lassen sich Spektraldarstellungen für den Green's Operator sehr einfach angeben:

$$(3.2) \quad \tilde{R}_s^{(m,n)}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \tilde{R}_s^{(m,n)}(t) = \\ = \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\omega} \frac{\tilde{R}^{(m,n)}(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega - si\epsilon} = \frac{\overset{(m,n)}{S}}{\omega + si\epsilon - \hat{A}}.$$

(Der Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0^+$ wird im folgenden nicht mehr explizit vorge-schrieben.)

Das letzte Gleichheitszeichen in (3.2) ist eine Folge von

$$(3.3) \quad \tilde{R}^{(m,n)}(\omega) = 2\pi \delta(\omega - \hat{A}) \overset{(m,n)}{S},$$

was sich direkt aus der Definition (2.7) ablesen läßt.

Tabelle 1

$\hat{S}(t)$	$(A_i^+ \hat{S}(t-t') A_j^+)$	Matrixschreibweise für einen "Satz von Funktionen"
$\hat{\mathcal{R}}^{(0,1)}(t) = e^{-it\hat{H}} \hat{\underline{g}}$	$K_{ij}(t,t') = \langle A_i(t) A_j^+(t') \rangle$ gewöhnliche Korrelationsfunktion	$K(t,t') = (A^+ \hat{\mathcal{R}}^{(0,1)}(t-t') A^+)$
$\hat{\mathcal{R}}^{(\pm 1,1)}(t) = e^{-it\hat{H}} (\hat{\underline{g}} \pm \underline{g})$	$K_{ij}^{(\pm)}(t,t') = \langle [A_i(t), A_j^+(t')]_{\pm} \rangle$ (Anti-)Kommutator-Korrelations- funktion	$K^{(\pm)}(t,t') = (A^+ \hat{\mathcal{R}}^{(\pm 1,1)}(t-t') A^+)$
$\eta_c(t) = \frac{1}{i} e^{-it\hat{H}} (\theta(t)\hat{\underline{g}} - \theta(-t)\eta \underline{g})$	$G_{ij}^{(c)}(t,t') = \frac{1}{i} \langle \mathcal{T}_{\eta} [A_i(t) A_j^+(t')] \rangle$ kausale Green's Funktion	$G^{(c)}(t,t') = (A^+ \eta_c(t-t') A^+)$
$\eta_r(t) = \frac{\theta(t)}{i} e^{-it\hat{H}} (\hat{\underline{g}} + \eta \underline{g})$	$G_{ij}^{(r)}(t,t') = \frac{\theta(t-t')}{i} \langle [A_i(t), A_j^+(t')]_{\eta} \rangle$ retardierte Green's Funktion	$G^{(r)}(t,t') = (A^+ \eta_r(t-t') A^+)$
$\eta_a(t) = \frac{-\theta(-t)}{i} e^{-it\hat{H}} (\hat{\underline{g}} + \eta \underline{g})$	$G_{ij}^{(a)}(t,t') = \frac{-\theta(t-t')}{i} \langle [A_i(t), A_j^+(t')]_{\eta} \rangle$ avancierte Green's Funktion	$G^{(a)}(t,t') = (A^+ \eta_a(t-t') A^+)$

An diesen auf sehr einfache Weise erhaltenen Ergebnissen und insbesondere an dem Ausdruck (3.3) für die Fouriertransformierte des Korrelationsoperators erkennt man den großen formalen Vorteil, den die Einführung von Superoperatoren mit sich bringt. Mit Hilfe der beiden Identitäten

$$(3.4) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\epsilon}{\omega^2 + \epsilon^2} = \pi \delta(\omega)$$

$$(3.5) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\omega}{\omega^2 + \epsilon^2} = \text{PP} \frac{1}{\omega}$$

und den Formeln (3.2), (3.3) lassen sich verallgemeinerte Kramers-Kronig-Relationen aufschreiben, wenn man die Fouriertransformierte des Green's Operators in zwei hermitesche Anteile zerlegt:

$$(3.6) \quad \begin{aligned} \bar{K}_s^{(m,n)}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\bar{K}_s^{(m,n)}(\omega) + (\bar{K}_s^{(m,n)}(\omega))^+ \right] + i \frac{1}{2i} \left[\bar{K}_s^{(m,n)}(\omega) - (\bar{K}_s^{(m,n)}(\omega))^+ \right] \\ &= \mathcal{L}_s^{(m,n)}(\omega) + i \mathcal{V}_s^{(m,n)}(\omega) . \end{aligned}$$

Wegen der Hermiteizität des Liouvilleoperators¹⁾ $\hat{H}$ und des statistischen Operators $\mathcal{G}^{(m,n)}$ lassen sich folgende Beziehungen mit Hilfe der letzten Form von (3.2) einfach verifizieren:

$$(3.7) \quad (\bar{K}_s^{(m,n)}(\omega))^+ = \bar{K}_{-s}^{(m,n)}(\omega) ;$$

$$(3.8) \quad \mathcal{V}_s^{(m,n)}(\omega) = -s\pi \delta(\omega - \hat{H}) \mathcal{G}^{(m,n)} = -\frac{s}{2} \bar{K}^{(m,n)}(\omega) ;$$

$$(3.9) \quad \mathcal{L}_s^{(m,n)}(\omega) = \text{PP} \frac{\mathcal{G}^{(m,n)}}{\omega - \hat{H}} = \frac{\text{PP}}{s\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\omega} \frac{\mathcal{V}_s^{(m,n)}(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} .$$

Die Formeln (3.8), (3.9) machen ganz deutlich, daß der Korrelationsoperator die zentrale Größe darstellt: kennen wir ihn bzw. seine Matrixelemente, dann lassen sich daraus die Green's Funktionen berechnen. Diese Tatsache ist bereits an der Definition (2.8) zu erkennen; die Sprungfunktion stellt nur einen mathematischen Zusatz dar, dem keine physikalische Bedeutung zukommt.

Wegen der Hermiteizität der Operatoren (3.8), (3.9) sind ihre diagonalen Matrixelemente reell, und wir haben:

1) Im englischen Sprachgebrauch nennen wir den Superoperator $\hat{H}$ auch den "Liouvillian" (von: "Liouvilleoperator") eines Systems, wenn H den Hamiltonoperator des Systems bezeichnet.

$$(3.10) \quad \mathcal{R}_s(A_i | \bar{\mathcal{K}}_s^{(m,n)}(\omega) | A_i) = \frac{PP}{s\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\omega} \frac{\Im \mathcal{K}(A_i | \bar{\mathcal{K}}_s^{(m,n)}(\bar{\omega}) | A_i)}{\bar{\omega} - \omega}.$$

Alle Beziehungen in diesem Kapitel sind allein auf den dynamischen Anteil des Korrelationsoperators - den Evolutionsoperator $e^{it\hat{H}}$ des Systems - zurückzuführen. Der statistische Anteil $\hat{\mathcal{G}}^{(m,n)}$ ist überhaupt noch nicht benutzt worden; er erscheint deshalb in allen Gleichungen dieses Kapitels als bloßer Faktor¹⁾.

Im nächsten Kapitel werden wir einige Eigenschaften des statistischen Operators $\hat{\mathcal{G}}^{(m,n)} = m\hat{\mathcal{G}} + n\bar{\hat{\mathcal{G}}}$, $\hat{\mathcal{G}} = \frac{1}{Z} e^{\beta\hat{H}}$ untersuchen.

4. VERALLGEMEINERTES DISSIPATIONS-FLUKTUATIONS-THEOREM

Aus der Definitionsgleichung (2.4) für $\hat{\mathcal{G}}^{(m,n)}$ erhält man durch Erweitern,

$$\hat{\mathcal{G}}^{(m,n)} = \frac{1}{Z} (m e^{\beta\hat{H}} + n e^{\beta\bar{\hat{H}}}) = \frac{m e^{\beta\hat{H}} + n e^{\beta\bar{\hat{H}}}}{m' e^{\beta\hat{H}} + n' e^{\beta\bar{\hat{H}}}} \hat{\mathcal{G}}^{(m',n')}; \quad (m',n') \neq (0,0),$$

folgende wichtige Identität²⁾:

$$(4.1) \quad \hat{\mathcal{G}}^{(m,n)} = \frac{m e^{\beta\hat{H}} + n}{m' e^{\beta\hat{H}} + n'} \hat{\mathcal{G}}^{(m',n')}.$$

Wegen (3.3) kann man mit Hilfe von (4.1) auch die Gleichung

$$(4.2) \quad \bar{\mathcal{K}}^{(m,n)}(\omega) = \frac{m e^{\beta\omega} + n}{m' e^{\beta\omega} + n'} \bar{\mathcal{K}}^{(m',n')}(\omega)$$

für den Korrelationsoperator angeben; durch Integration über ω erhält man aus (4.2) noch

$$(4.3) \quad \hat{\mathcal{G}}^{(m,n)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{m e^{\beta\omega} + n}{m' e^{\beta\omega} + n'} \bar{\mathcal{K}}^{(m',n')}(\omega).$$

1) Dieser Faktor sichert uns die Konvergenz von Matrixelementen, wie z.B. in (3.10).

2) Weidlich [5] hat kürzlich ein D.-F.-Theorem veröffentlicht, was - auf der trivialen Identität $\hat{\mathcal{G}} = [\hat{\mathcal{G}}(\hat{\mathcal{G}}')^{-1}] \hat{\mathcal{G}}$ beruhend - für allgemeines $\hat{\mathcal{G}}$ gültig ist. Vergl. [26].

Die Gleichungen (4.1) bis (4.3) können als verallgemeinertes Dissipations-Fluktuations-Theorem angesehen werden. Wählt man speziell $(m,n)=(-1,1)$; $(m',n')=(+1,+1)$ und bildet Matrixelemente von (4.2), (4.3), so erhält man die bekannte Form (vergl. Tab. 1)

$$(4.4) \quad K_{ij}^{(-)}(\omega) = \tanh\left(\frac{\beta}{2}\omega\right) K_{ij}^{(+)}(\omega),$$

$$(4.5) \quad K_{ij}^{(-)}(t;t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} \tanh\left(\frac{\beta}{2}\omega\right) K_{ij}^{(+)}(\omega),$$

mit

$$(4.6) \quad K_{ij}^{(\pm)}(t,t) = \langle A_i^\dagger | \hat{R}^{(\pm 1,1)}(t-t') | A_j^\dagger \rangle = \langle [A_i(t), A_j^\dagger(t')]_{\pm} \rangle,$$

des Theorems, die einen Zusammenhang zwischen einer Kommutator-Korrelationsfunktion (dissipative Effekte) und der Antikommutator-Korrelationsfunktion (Fluktuationen) herstellt.

Eine weitere, sehr nützliche Formel bekommt man aus Gleichung (4.1), wenn man $(m,n)=(1,-1)$, $(m',n')=(0,1)$ wählt:

$$(4.7) \quad \boxed{\hat{G} = (\bar{e}^{-\beta\hat{H}} - 1)\bar{G} = -\int_0^\beta d\lambda \bar{e}^{-\lambda\hat{H}} \hat{H} \bar{G}}$$

Wendet man beide Seiten von (4.7) auf $|B\rangle$ an und projiziert dann auf $\langle A^\dagger|$, so folgt:

$$(4.8a) \quad \langle [A,B]_- \rangle = \int_0^\beta d\lambda \langle [A,H]_- B(i\lambda) \rangle,$$

was sich für Heisenberg-Operatoren $A^\dagger(t)$ und $B(t')$ z.B. auch in der Form

$$(4.8b) \quad \langle [A(t), B(t')]_- \rangle = \frac{1}{t} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\beta d\lambda \langle A(t-i\lambda) B(t') \rangle$$

schreiben läßt. Diese Form ist als sogenannte 'Kubo - Identität' in der Literatur bekannt. [6]

Wir werden später noch eine Reihe wichtiger Anwendungen der Identität (4.1) und der daraus abgeleiteten Formeln dieses Kapitels kennenlernen.

5. BEWEGUNGSGLEICHUNGEN

Bei den Diskussionen in diesem Kapitel ist die kompakte Superoperator-Schreibweise besonders handlich, weil man die allgemeinen Erörterungen durchführen kann, ohne auf die spezielle Struktur des Hamiltonoperators oder auf seine Vertauschungseigenschaften mit anderen Operatoren, etwa den Feldoperatoren, einzugehen.

Durch Differentiation der Definitionsgleichung (2.7) erhält man:

$$(5.1) \quad \left(i \frac{d}{dt} - \hat{H} \right) \tilde{K}^{(m,n)}(t) = 0 ; \quad \tilde{K}^{(m,n)}(t=0) = \mathcal{G}^{(m,n)} .$$

Der Korrelationsoperator ist eine stetige Funktion der Zeit t ; deshalb läßt sich ohne weiteres obige Anfangsbedingung angeben, die neben der Differentialgleichung zur eindeutigen Bestimmung der Lösung notwendig ist.

Aufgrund der Sprungfunktion in (2.8) genügt der 'Green's Operator' der inhomogenen Differentialgleichung:¹⁾

$$(5.2) \quad \left(i \frac{d}{dt} - \hat{H} \right) \tilde{K}_s^{(m,n)}(t) = \delta(t) \mathcal{G}^{(m,n)} ; \quad \tilde{K}_s^{(m,n)}(t) \Big|_{st < 0} = 0 .$$

Im Unterschied zum Korrelationsoperator ist der Green's Operator an der Stelle $t=0$ unstetig; zur eindeutigen Festlegung der Lösung der Differentialgleichung dient die Randbedingung, daß der Operator für $st < 0$ verschwindet.

Man überzeugt sich leicht davon, daß der in (2.10) definierte kausale Green's Operator wegen der Tatsache $\overset{(0,1)}{\mathcal{G}} + \overset{(0,0)}{\mathcal{G}} = \overset{(0,1)}{\mathcal{G}}$ eben derselben inhomogenen Bewegungsgleichung vom Typ (5.2) genügt:

$$(5.3) \quad \left(i \frac{d}{dt} - \hat{H} \right) \mathcal{G}_c(t) = \delta(t) \overset{(0,1)}{\mathcal{G}} .$$

Vom retardierten und avancierten Green's Operator muß man ihn durch Angabe einer entsprechenden Randbedingung unterscheiden; diese läßt sich anhand der Darstellung in Tab. 1 und mit Hilfe der Identität (4.1) leicht angeben:

¹⁾ Dieser Inhomogenität verdanken die Funktionen ihren Namen.

$$(5.4) \quad \eta_c(t)|_{t < 0} = -\eta \frac{1}{i} \bar{e}^{it\hat{H}} \underline{\eta} = -\eta \bar{e}^{-\beta\hat{H}} \eta_c(t)|_{t > 0}.$$

Nun ist diese Form der "Randbedingung" für praktische Zwecke sehr unhandlich. Man kann aber folgenden bekannten Trick anwenden [7]: um die Analogie zwischen dem statistischen Faktor $\bar{e}^{\beta\hat{H}}$ und dem Evolutionsoperator $\bar{e}^{it\hat{H}}$ auszunutzen, definieren wir einen kausalen Green's Operator von der gleichen funktionalen Struktur wie in (2.10) bzw. Tab. 1 für rein imaginäre Werte der Variablen t auf dem Intervall:

$$(5.5) \quad -\beta \leq it \leq +\beta.$$

In den Sprungfunktionen in (2.10) ist t durch it zu ersetzen, wenn wir den kausalen Green's Operator auf dem Intervall (5.5) betrachten - oder, was damit gleichbedeutend ist: der $\mathcal{T}_\eta$ -Zeitordnungsoperator ordne in diesem Fall nach steigenden Werten von it .

Die Einschränkung auf das Intervall (5.5) garantiert die Beschränktheit des so definierten Operators, wenn man voraussetzt, daß im Falle reeller Zeiten der Exponent $-\beta = -(kT)$ im statistischen Operator für alle Temperaturen $\beta > 0$ für die Konvergenz der Superoperator-Matrixelemente (Korrelationsfunktionen) sorgt.

Außerhalb des Intervalls (5.5) denkt man sich die Operatorfunktion periodisch fortgesetzt; die "Randbedingung" (5.4) läßt sich dann als Quasi-Periodizitätsbedingung formulieren:

$$(5.6) \quad \eta_c(t) = -\eta \eta_c(t - i\beta), \quad \text{Periode } p = -i\beta.$$

Am einfachsten wird die Bedingung (5.6) in einer Fourier-Reihenentwicklung für $\eta_c(t)$ berücksichtigt (siehe Anhang A5):

$$(5.7) \quad \eta_c(t) = \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} \bar{e}^{iz_{\nu}t} \eta_c(z_{\nu}); \quad z_{\nu} = \frac{\pi}{-i\beta} \left\{ 2\nu + \frac{1}{2}(1+\eta) \right\}.$$

Die Umkehrung zu (5.7) lautet:

$$(5.8) \quad \eta_c(z_{\nu}) = \int_0^{-i\beta} dt e^{iz_{\nu}t} \eta_c(t),$$

aus der sich ein Zusammenhang zwischen den Fourierkoeffizienten

und dem physikalisch interessanten Spektraloperator¹⁾

$$(5.9) \quad \tilde{K}^{(\eta,1)}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{it\omega} \tilde{e}^{-it\hat{H}} \frac{1}{S} = 2\pi \delta(\omega - \hat{H}) \frac{1}{S}$$

herstellen läßt, wenn man beachtet, daß für den ganzen Integrationsbereich in (5.8) $it \geq 0$ gilt. Wegen $\left| \mathcal{O}_c(t) \right|_{it>0} = \frac{1}{i} \tilde{K}^{(0,1)}(t)$ erhält man unter Benützung von (4.1) aus (5.8):

$$(5.10) \quad \mathcal{O}_c(z_p) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{-i \tilde{K}^{(\eta,1)}(\omega)}{\omega - z_p}$$

Den Spektraloperator $\tilde{K}^{(\eta,1)}(\omega)$ findet man nun wie folgt aus den Fourierkoeffizienten $\mathcal{O}_c(z_p)$: man setzt die Koeffizienten, die durch das Integral in (5.10) zunächst nur an den Stellen $z_p = \frac{1}{-i\beta} \left\{ 2\nu + \frac{1}{2}(1+\eta) \right\}$ definiert sind, analytisch in die ganze z -Ebene fort - in (5.10) bedeutet das nur das Weglassen des Index p am z [7]. Aufgrund der Eigenschaften des Cauchy-Integrals in (5.10) ist dann:

$$(5.11) \quad \tilde{K}^{(\eta,1)}(\omega) = i \left[\mathcal{O}_c(z = \omega + i\varepsilon) - \mathcal{O}_c(z = \omega - i\varepsilon) \right]$$

Die Fourierkoeffizienten, die man zur Anwendung von (5.11) benötigt, folgen direkt aus der Bewegungsgleichung (5.3):

$$(5.12) \quad (z_p - \hat{H}) \mathcal{O}_c(z_p) = \frac{1}{S} \longleftrightarrow \mathcal{O}_c(z_p) = \frac{\frac{1}{S}}{z_p - \hat{H}}$$

6. IST DIE EINFÜHRUNG DER KAUSALEN GREEN'S FUNKTION UNNÖTIG?

Im vorigen Kapitel wurde der mühevollen Weg aufgezeigt, den man gehen muß, um den Zusammenhang (5.11) herzustellen, und der sich in sehr ähnlicher Form in allen neueren Lehrbüchern über die Methode der Green's Funktionen findet [7], [8]. Der Umweg über die Einführung "rein imaginärer Zeiten"

¹⁾ Zusammenhang mit der von Kadanoff und Baym [7] (S. 7, Gl. 1-14) definierten Spektralfunktion:

$$A(\vec{p}, \omega) = \int d\vec{p}' (\psi^\dagger(\vec{p}) | \tilde{K}^{(\eta,1)}(\omega) | \psi^\dagger(\vec{p}'))$$

wird durch die sehr unhandliche Eigenschaft (5.4) des kausalen Green's Operators nötig.

Der mathematische Aufwand des Kapitels 5 ist allerdings nicht erforderlich, wenn es nur darum geht, den Spektraloperator $\hat{K}^{(\eta,1)}(\omega)$ zu berechnen. Das Ergebnis (5.11), (5.12) läßt sich nämlich direkt aus (3.3) bzw. der Definition (5.9) ablesen, wenn man die Darstellung

$$(6.1) \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{x - i\varepsilon} - \frac{1}{x + i\varepsilon} \right\}$$

der Dirac- δ -Funktion benutzt:

$$(6.2) \quad \hat{K}^{(\eta,1)}(\omega) = 2\pi \delta(\omega - \hat{H}) \hat{S}^{(\eta,1)} = i \left[\frac{\hat{S}^{(\eta,1)}}{\omega + i\varepsilon - \hat{H}} - \frac{\hat{S}^{(\eta,1)}}{\omega - i\varepsilon - \hat{H}} \right].$$

Wie man sieht, wird man durch (6.2) auf das Studium des Operators

$$(6.3) \quad \hat{O}_f(z) = \frac{\hat{S}^{(\eta,1)}}{z - \hat{H}}, \quad (z \text{ komplex})$$

gelenkt, ohne überhaupt Green's Funktionen bzw. -Operatoren eingeführt zu haben. Für $z = i\varepsilon$ wird deutlich, daß der (Super-)Propagator, wie wir den Superoperator (6.3) nennen wollen, im wesentlichen die Laplacetransformierte des speziellen Korrelationsoperators $\hat{K}^{(\eta,1)}(t)$ ist.¹⁾ Dies ist wieder ein Hinweis auf die zentrale Stellung, die der Korrelationsoperator einnimmt, der alle physikalischen Informationen über ein System in kompakter Form enthält.

Im Kapitel 3 wurde bei der Formulierung der Dispersions-Relationen schon auf den Umstand aufmerksam gemacht, daß der Korrelationsoperator bereits sämtliche physikalischen Eigenschaften eines Systems beschreibt, während die Green's Operatoren lediglich noch mit zusätzlichen - physikalisch irrelevanten - Sprungfunktionen versehen sind. Ferner stellt man bei der Untersuchung der in der Einleitung gegebenen Beispiele für das Auftreten von Green's Funktionen sehr schnell fest, daß man in allen Fällen eigentlich nur eine Korrelationsfunktion gebraucht hätte, die dann erst zur Green's Funktion "aufgebläht" wurde.

¹⁾ Die Wahl $(m,n) = (\eta,1)$ eignet sich besonders für Vielteilchen- (Boson- oder Fermion-) Systeme; vergl. nächstes Kapitel.

Angesichts dieser Tatsachen stellt sich sofort die Frage nach der Notwendigkeit der Einführung von Green's Funktionen¹⁾, speziell der kausalen Green's Funktion.

Der einzige Grund für die Verwendung der kausalen Green's Funktion ist darin zu sehen, daß die von Feynman und Dyson entwickelte Diagramm-Technik speziell auf die kausale Green's Funktion zugeschnitten ist. Zusammen mit der Anwendung des Wick'schen Theorems (bzw. seiner Verallgemeinerung auf den Fall $T \neq 0$) ermöglicht die Diagramm-Technik eine konsequente Entwicklung der kausalen Green's Funktion nach Potenzen des Wechselwirkungsoperators in einem Vielteilchensystem.

Der Versuch, eine solche Entwicklung an einer gewöhnlichen Korrelationsfunktion ohne die Hilfe der Diagramm-Technik auszuführen, zeigt, weshalb der "Umweg" über die kausale Green's Funktion so oft eingeschlagen wird. Da nämlich der Hamiltonoperator in der Korrelationsfunktion nicht nur in den zeitabhängigen Heisenberg-Operatoren sondern auch im Dichteoperator (und dort sogar im "Zähler" und "Nenner") vorkommt, wird eine konsequente Entwicklung nach Potenzen des Wechselwirkungsoperators hoffnungslos kompliziert. Durch den in der kausalen Green's Funktion auftretenden Zeitordnungs-Operator $\mathcal{T}_q$ wird dann eine Reihe von Schwierigkeiten umgangen und insbesondere die Anwendung des Wick'schen Theorems ermöglicht.

Nach diesen Bemerkungen über die Entwicklung von Korrelationsfunktionen nach Potenzen des Zweiteilchen-Wechselwirkungsoperators steht die Nützlichkeit der Einführung der kausalen Green's Funktion vor einer derartigen Entwicklung außer Zweifel.

Eine andere Frage ist die nach der Güte einer Entwicklung der Green's Funktion nach Potenzen des Wechselwirkungsoperators als Approximation für die tatsächliche Funktion. Die Antwort ist, daß in fast allen interessanten Fällen unendlich viele Terme mitgenommen werden müssen, um physikalisch brauchbare Ergebnisse zu erzielen. Die Dyson-Gleichung, die

¹⁾ Hier sind selbstverständlich nur die vorher erwähnten Green's Funktionen (2.10) gemeint, also nicht die 'Green's Funktionen der Mathematik', d.h. die "Lösungen irgendwelcher Differentialgleichungen mit δ -Funktions-Inhomogenität".

im nächsten Kapitel behandelt wird, stellt - in der Sprache der Diagramm-Technik - eine exakte Aufsummation aller Diagramme dar; sie ist also einfach eine identische Umschreibung für die Green's Funktion und dient als Ausgangspunkt für physikalisch brauchbare Approximationen.

7. DYSON-GLEICHUNG

Wir werden in diesem Kapitel den (Super-)Propagator (6.3) und - im Hinblick auf den Vergleich mit kausalen (Temperatur-)Green's Funktionen - seine Matrixelemente bezüglich Feldoperatoren¹⁾

$$(7.1) \quad G_{\alpha\alpha'}(\vec{x}, \vec{x}'; z) = (\psi_{\alpha}^+ | G(z) | \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}')) \quad \text{mit} \quad G(z) = \frac{\hat{G}}{z - \hat{H}}$$

untersuchen. Für die nun folgenden Entwicklungen wird es sich als zweckmäßig erweisen, die Menge aller $G_{\alpha\alpha'}(\vec{x}, \vec{x}'; z)$ für verschiedene $(\vec{x}, \vec{x}', \alpha')$ gleichzeitig zu betrachten und für sie die symbolische Matrix-Schreibweise

$$(7.2) \quad \boxed{G(z) = (\psi^+ | G(z) | \psi^+)}$$

einzuführen. Die Elemente der Matrix (7.2) machen die Menge aller $G_{\alpha\alpha'}(\vec{x}, \vec{x}'; z)$ aus (7.1) aus. (Eine ähnliche Methode wurde von Mori [9] bei der Herleitung von Bewegungsgleichungen für einen Satz von Operatoren benutzt und von Kawasaki [10] bei der Behandlung kritischer Fluktuationen angewendet. Weitere Einzelheiten und eine Diskussion über den Zusammenhang der vorliegenden Arbeit mit der von Mori finden sich im Anhang A4.)

Mit Hilfe des (Super-)Propagators $G(z)$ haben wir in (7.2) eine sehr nützliche, darstellungsfreie Form für den (gewöhnlichen) Propagator $G(z)$ gewonnen. Dies wird deutlich, wenn man die Eigenschaften der Feldopera-

¹⁾ Für Matrixelemente bezüglich Spinoperatoren vergl. Kap. 13 und den Anhang A2.

toren berücksichtigt:¹⁾

$$(7.3) \quad \psi_\alpha(\vec{x}) = \sum_n \langle \vec{x} | n \rangle \psi_n \equiv \langle \vec{x} | \cdot \rangle \cdot \psi ;$$

$\{|n\rangle\}$ ist irgendein vollständiges Orthonormalsystem im Einteilchen-Hilbert-Raum, ψ_n vernichtet ein Teilchen im Zustand $|n\rangle$ ²⁾. Die Bedeutung des symbolischen Punkt-Produkts " $\cdot$ " ist aus (7.3) abzulesen: «Ein und derselbe Index (Quantenzahl, Variable) wird an die Leerstellen der Symbole zur Linken und zur Rechten des Punkts eingesetzt; dann ist über diesen Index zu summieren bzw. zu integrieren.» Das Punkt-Produkt-Zeichen ermöglicht eine übersichtliche, kurze und darstellungsfreie Schreibweise sehr vieler Formeln der Zweiten Quantisierung.

Mit Hilfe von (7.3) verifiziert man leicht:

$$(7.4) \quad G_{\alpha\alpha'}(\vec{x}, \vec{x}'; \vec{z}) \equiv \langle \vec{x} | G(\vec{z}) | \vec{x}' \rangle = \sum_{n, n'} \langle \vec{x} | n \rangle \langle n | G(\vec{z}) | n' \rangle \langle n' | \vec{x}' \rangle$$

mit

$$(7.5) \quad \langle n | G(\vec{z}) | n' \rangle = (\psi_n^+ | G(\vec{z}) | \psi_{n'}^+) = G_{nn'}(\vec{z}) .$$

Wir kommen nun zurück zur Herleitung der Dyson-Gleichung und nehmen dazu an, der Liouvilleoperator $\hat{H}$ des Systems bestehe aus zwei Anteilen:³⁾

$$(7.6) \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 | \psi^+ \rangle = | \psi^+ \rangle \cdot \Omega_0 .$$

Definieren wir dann noch den "ungestörten" (gewöhnlichen) Propagator

$$(7.7) \quad G^{(0)}(\vec{z}) = \frac{1}{\vec{z} - \Omega_0} \quad \longleftrightarrow \quad (\vec{z} - \Omega_0) \cdot G^{(0)}(\vec{z}) = 1 ,$$

1) vergl. Anhang A1

2) $\psi_\alpha^+(\vec{x}) = (\psi_\alpha(\vec{x}))^+ = \psi^+ \cdot \langle \vec{x} | \alpha \rangle$

3) Für ein System von N identischen Teilchen ist $\hat{H}_0$ der Einteilchen-Anteil und $\hat{H}_1$ z.B. der Zweiteilchen-Wechselwirkungsanteil im Liouvilleoperator. Vergl. hierzu Anhang A1.

so läßt sich (7.2) durch zweimalige Anwendung der Operator-Identität

$$(7.8) \quad \frac{1}{A-B} = \frac{1}{A} + \frac{1}{A} B \frac{1}{A-B} = \frac{1}{A} + \frac{1}{A-B} B \frac{1}{A}$$

wie folgt umformen:

$$(7.9) \quad G(z) = (\psi^+ | \left\{ \hat{S} \frac{1}{z - \hat{H}_0} + \frac{\hat{S}}{z - \hat{H}} \hat{H}_1 \frac{1}{z - \hat{H}_0} \right\} | \psi^+) = \\ = G^{(0)}(z) + G^{(0)}(z) \cdot \Sigma(z) \cdot G^{(0)}(z) .$$

Darin steht $\Sigma(z)$, die sogenannte "self-energy"-Matrix, für:

$$(7.10) \quad \Sigma(z) = (\psi^+ | \hat{S} \hat{H}_1 | \psi^+) + (\psi^+ | \hat{H}_1 \frac{\hat{S}}{z - \hat{H}} \hat{H}_1 | \psi^+) .$$

In (7.9) wurde die wichtige Tatsache benutzt, daß die Vertauschungsrelationen für die Feldoperatoren die Gleichung

$$(7.11) \quad (\psi^+ | \hat{S} | \psi^+) = 1 \quad , \quad (\text{Einheits-Matrix})$$

zur Folge haben, denn es gilt:

$$(7.12) \quad (\psi_{\alpha}^+(\vec{x}) | \hat{S} | \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}')) = \langle [\psi_{\alpha}(\vec{x}), \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}')]_{\eta} \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') .$$

Mit Hilfe der Operator-Identität [25]

$$(7.13) \quad \frac{1}{A} + \frac{1}{A} C \frac{1}{A} = \frac{1}{A-B} \quad \text{mit} \quad B = \frac{1}{1 + C \frac{1}{A}} C$$

läßt sich (7.9) auch auf die übliche Form der Dyson-Gleichung bringen:

$$(7.14) \quad G(z) = \frac{1}{z - \Omega_0 - \Sigma^*(z)} = G^{(0)}(z) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \Sigma^*(z) \cdot G^{(0)}(z) \right\}^n ,$$

wobei die sogenannte "proper self-energy"-Matrix durch die Beziehung

$$(7.15) \quad \Sigma^*(z) = \frac{1}{1 + \Sigma(z) \cdot G^{(0)}(z)} \cdot \Sigma(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left\{ \Sigma(z) \cdot G^{(0)}(z) \right\}^n \cdot \Sigma(z)$$

mit der "self-energy"-Matrix (7.10) verknüpft ist. Als Beispiel für die Interpretation des Punkt-Produkts geben wir noch die Matrixelemente von (7.9) in Ortsdarstellung:

$$(7.16) \quad G_{\alpha\alpha'}(\vec{x}, \vec{x}'; \vec{z}) = G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\vec{x}, \vec{x}'; \vec{z}) + \\ + \sum_{\beta\beta'} \int d\vec{y} \int d\vec{y}' G_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}; \vec{z}) \sum_{\beta\beta'} G_{\beta\beta'}(\vec{y}, \vec{y}'; \vec{z}) G_{\beta\alpha'}^{(0)}(\vec{y}', \vec{x}'; \vec{z}).$$

Gleichung (7.14) stellt die Dyson-Gleichung in der Form dar, wie sie sonst durch Anwendung des Wick'schen Theorems und der Diagramm-Technik erhalten wird. Ferner gibt (7.15) die "proper self-energy" in analytischer Form, nämlich als Matrixelemente von Superoperatoren. Gleichung (7.15) (zusammen mit (7.14)) bietet sich als Ausgangspunkt für Approximationen an - und zwar insbesondere im Fall sogenannter "hard core interactions", bei denen jeder einzelne Term in der Reihe (7.15) divergiert, die Summe aber endlich bleibt.

Für nicht-singuläre, schwache Potentiale versucht man im allgemeinen einen Näherungsausdruck für $\Sigma^*(\vec{z})$ zu gewinnen, indem man nur die Terme in niedrigster Ordnung in H_1 berücksichtigt. Da der erste Summand in (7.10)

$$(7.17) \quad \Sigma^*(\vec{z}) \cong \Sigma_{(1)}^* = \sum_{(1)} = \langle \psi^+ | \hat{g} \hat{H}_1 | \psi^+ \rangle$$

die volle Dichtematrix $\hat{g}(H_0 + H_1)$ enthält, stellt er - im Sinne der Diagramm-Technik - bereits eine Summe von unendlich vielen Diagrammen dar. Im Kapitel 10 wird (7.17) für einen Zweiteilchen-Wechselwirkungsoperator berechnet und gezeigt, daß es sich um die selbstkonsistente Selbstenergie in Hartree-Fock-Approximation handelt.

Im folgenden Kapitel wollen wir eine modifizierte Form der Dyson-Gleichung mit Hilfe eines geeignet gewählten "Projektors" herleiten. Wir werden sehen, daß diese Methode dann bereits in der größten Näherung die selbstkonsistente Hartree-Fock-Approximation für die Green's Funktion liefert.¹⁾

¹⁾ Da der Hartree-Fock-Term für "hard-core interactions" divergiert, ist diese Methode für solche Potentiale nicht geeignet. Vergl. Kadanoff und Baym [7].

8. MODIFIZIERTE DYSON-GLEICHUNG

Wir definieren den idempotenten Operator¹⁾

$$(8.1) \quad \mathcal{P} = |\psi^+\rangle \langle \psi^+|^{\langle 1,1 \rangle} = \sum_{\alpha} \int d\vec{x} |\psi_{\alpha}^+(\vec{x})\rangle \langle \psi_{\alpha}^+(\vec{x})|^{\langle 1,1 \rangle}$$

und zerlegen den Liouvilleoperator $\hat{H}$ in zwei Anteile

$$(8.2) \quad \hat{H} = \hat{H}' + \hat{H}'' \text{ mit } \hat{H}' = \mathcal{P} \hat{H} \mathcal{P} + Q \hat{H} Q; \quad \hat{H}'' = \mathcal{P} \hat{H} Q + Q \hat{H} \mathcal{P},$$

wobei abkürzend $Q = 1 - \mathcal{P}$ gesetzt wurde. Wegen $\mathcal{P}Q = 0$ gelten die Beziehungen:

$$(8.3) \quad \mathcal{P} \hat{H}' = \mathcal{P} \hat{H} \mathcal{P} = \hat{H}' \mathcal{P}; \quad \mathcal{P} \hat{H}'' = \mathcal{P} \hat{H} Q = \hat{H}' Q; \quad Q \hat{H}'' = Q \hat{H} \mathcal{P} = \hat{H}'' \mathcal{P};$$

und die Entwicklung von (7.2) nach $\hat{H}''$ ergibt

$$(8.4) \quad G(z) = \langle \psi^+ | \mathcal{G}^{\langle 1,1 \rangle} \left\{ \frac{1}{z - \hat{H}'} + \frac{1}{z - \hat{H}'} \hat{H}'' \frac{1}{z - \hat{H}'} + \frac{1}{z - \hat{H}'} \hat{H}'' \frac{1}{z - \hat{H}'} \hat{H}'' \frac{1}{z - \hat{H}'} \right\} | \psi^+ \rangle \\ = \frac{1}{z - \Omega} + \frac{1}{z - \Omega} \cdot M(z) \cdot G(z),$$

wobei abkürzend

$$(8.5) \quad \Omega = \langle \psi^+ | \mathcal{G}^{\langle 1,1 \rangle} \hat{H} | \psi^+ \rangle = \Omega_0 + \Sigma_{(1)}^*$$

und

$$(8.6) \quad M(z) = \langle \psi^+ | \hat{H} Q \mathcal{G}^{\langle 1,1 \rangle} \frac{1}{z - Q \hat{H} Q} Q \hat{H} | \psi^+ \rangle$$

gesetzt wurde.²⁾ In der Darstellung (8.6) von $M(z)$ wurden die Vertauschbarkeit von $\mathcal{G}^{\langle 1,1 \rangle}$ mit $\hat{H}$ und

1) Wegen der Nicht-Hermiteizität von $\mathcal{P}$ ist es kein Projektor im üblichen Sinne - wir benutzen im folgenden nur seine Idempotenz.

2) $M(z)$ entspricht exakt dem von Kadanoff und Baym [7] benutzten Σ_C ('Stoßterm' der Selbst-Energie).

$$(8.7) \quad \hat{S}^{(\eta,1)} \mathcal{P} = \mathcal{P}^+ \hat{S}^{(\eta,1)}$$

ausgenutzt.

Nach $\hat{G}(\mathbf{z})$ aufgelöst lautet Gleichung (8.4) für den Propagator

$$(8.8) \quad \boxed{\hat{G}(\mathbf{z}) = \frac{1}{\mathbf{z} - \Omega - M(\mathbf{z})} \longleftrightarrow (\mathbf{z} - \Omega - M(\mathbf{z})) \cdot \hat{G}(\mathbf{z}) = 1}$$

oder in Matrixelementen ausgeschrieben:

$$(8.9) \quad \sum_{\beta} \int d\vec{y} \left[\mathbf{z} \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{x} - \vec{y}) - \Omega_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{y}) - M_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{y}; \mathbf{z}) \right] G_{\beta\alpha'}(\vec{y}, \vec{x}'; \mathbf{z}) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{x} - \vec{x}').$$

Vernachlässigt man in der modifizierten Dyson-Gleichung (8.8) bzw. (8.9) die Matrix $M(\mathbf{z})$, so bekommt man für $\hat{G}(\mathbf{z})$ die (selbstkonsistente) Hartree-Fock-Approximation

$$(8.10) \quad \boxed{G^{\text{HF}}(\mathbf{z}) = \frac{1}{\mathbf{z} - \Omega} \longleftrightarrow (\mathbf{z} - \Omega) \cdot G^{\text{HF}}(\mathbf{z}) = 1} \quad ;$$

im Einzelnen wird diese Näherung im Kapitel 10 diskutiert.

Es ist interessant, die allgemeine Form für die Spektralmatrix (vergl. Tab. 1), d.h. die Menge der Matrixelemente des Spektraloperators (5.11) bzw. (6.2),

$$(8.11) \quad K^{(\eta)}(\omega) = \langle \psi^+ | \hat{K}^{(\eta,1)}(\omega) | \psi^+ \rangle$$

aufzuschreiben, die sich aus der Form (8.8) des Propagators ergibt. Zunächst zeigt (8.6), daß $M(\mathbf{z})$ von der gleichen Struktur wie $\hat{G}(\mathbf{z})$ ist:

$$(8.12) \quad M(\mathbf{z}) = \langle \psi_{(1)}^+ | \hat{S}^{(\eta,1)} \frac{1}{\mathbf{z} - L_1} | \psi_{(1)}^+ \rangle \text{ mit } \begin{aligned} L_1 &= Q \hat{H} Q, \\ | \psi_{(1)}^+ \rangle &= Q \hat{H} | \psi^+ \rangle. \end{aligned}$$

Führt man nun die Matrix

$$(8.13) \quad \Gamma^{(\eta)}(\omega) = 2\pi \langle \psi_{(1)}^+ | \hat{S}^{(\eta,1)} \delta(\omega - L_1) | \psi_{(1)}^+ \rangle, \quad [\Gamma^{(\eta)}(\omega)]^+ = \Gamma^{(\eta)}(\omega)$$

ein, dann läßt sich $M(z)$ analog zur Form (5.10) als ein Cauchy-Integral schreiben

$$(8.14) \quad M(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\omega} \frac{(-i) \Gamma^{(\eta)}(\tilde{\omega})}{\tilde{\omega} - z},$$

und für $z = \omega \pm i\varepsilon$ haben wir die Zerlegung:

$$(8.15) \quad M(\omega \pm i\varepsilon) = \frac{PP}{2\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\Gamma^{(\eta)}(\tilde{\omega})}{\omega - \tilde{\omega}} \mp i \frac{1}{2} \Gamma^{(\eta)}(\omega).$$

Für die Diagonalelemente der Matrix $M(\omega)$ stellt (8.15) eine Zerlegung in Real- und Imaginärteil dar, denn die Diagonalelemente von (8.13) sind wegen der Hermiteizität von $\hat{S}^{(\eta)}(\omega - L_4)$ reell.

Setzt man (8.15) unter Benutzung von (5.11) in (8.11) ein, so erhält man für die Spektralmatrix:

$$(8.16) \quad K^{(\eta)}(\omega) = i \left\{ \frac{1}{\left[\omega - \Omega - \frac{PP}{2\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\Gamma^{(\eta)}(\tilde{\omega})}{\omega - \tilde{\omega}} \right] + i \frac{\Gamma^{(\eta)}(\omega)}{2}} - \frac{1}{\left[\omega - \Omega - \frac{PP}{2\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\Gamma^{(\eta)}(\tilde{\omega})}{\omega - \tilde{\omega}} \right] - i \frac{\Gamma^{(\eta)}(\omega)}{2}} \right\}.$$

Für den Spezialfall eines translationsinvarianten Systems (der Hamiltonoperator vertauscht mit dem Operator des Gesamtimpulses $\vec{P}$) und spinunabhängiger Zweiteilchen-Wechselwirkung ist die Spektralmatrix (8.16) in der Impulsdarstellung (vergl. Anhang A1) diagonal, und wir bekommen für die Diagonalelemente (Spektralfunktion)¹⁾:

$$(8.17) \quad K^{(\eta)}(\vec{p}, \omega) = \frac{\chi(\vec{p}, \omega)}{[\omega - E(\vec{p}) - \Delta(\vec{p}, \omega)]^2 + [\frac{1}{2} \chi(\vec{p}, \omega)]^2}$$

mit

$$(8.18) \quad \langle \vec{p} | \Omega | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') E(\vec{p}),$$

$$(8.19) \quad \langle \vec{p} | \Gamma^{(\eta)}(\omega) | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \chi(\vec{p}, \omega),$$

$$(8.20) \quad \Delta(\vec{p}, \omega) = \frac{PP}{2\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\chi(\vec{p}, \tilde{\omega})}{\omega - \tilde{\omega}}.$$

¹⁾ Die Spektralfunktion (8.17) ist identisch mit der von Kadanoff und Baym [7], S. 36 (4 - 22). Siehe auch Fußnote S. 21!

Wie schon mehrmals erwähnt, ist $E(\vec{p})$ die (selbstkonsistente) Hartree-Fock-Energie. Es ist zu bemerken, daß der Zusammenhang (8.17) exakt ist. Wenn $\Delta(\vec{p};\omega)$ und $\gamma(\vec{p};\omega)$ mit ω langsam veränderliche Funktionen sind, kann man sie als Linienverschiebung bzw. Linienbreite eines Einteilchen-Anregungsspektrums mit "peaks" an den Stellen $\omega=E(\vec{p})$ betrachten. Die Linienbreite, d.h. die endliche Lebensdauer der Anregungszustände, sowie die Linienverschiebung sind auf die dynamischen Wechselwirkungen der Teilchen zurückzuführen. (Vergl. hierzu auch [7], S. 36)

9. KETTENBRUCHENTWICKLUNG DES PROPAGATORS (GREEN'S FUNKTION)

Bevor wir im nächsten Kapitel einige Vorteile der Superoperator-Formulierung anhand der Hartree-Fock-Approximation demonstrieren, wollen wir jetzt der Vollständigkeit halber noch eine exakte Umschreibung des Propagators angeben. Und zwar handelt es sich dabei um eine simple Fortführung des im vorigen Paragraphen geschilderten Projektionsverfahrens. Die Form (8.12) für den dynamischen Anteil der Selbstenergie, $M(\vec{z})$, legt es nahe, diesen wiederum durch eine Dyson-Resolvente auszudrücken. Zur Herleitung dieser Kettenbruchentwicklung definieren wir am besten für $i=0,1,2,\dots$ Matrizen von der Form

$$(9.1) \quad G_i(\vec{z}) = (\Psi_{(i)}^+ | \mathcal{G} \frac{1}{\vec{z} - L_i} | \Psi_{(i)}^+) \cdot (\Psi_{(i)}^+ | \mathcal{G} | \Psi_{(i)}^+)^{-1},$$

in denen $\Psi_{(i)}^+$ und L_i noch beliebige Operatoren¹⁾ sind. Unter Verwendung des idempotenten Operators

$$(9.2) \quad \mathcal{P}_i = |\Psi_{(i)}^+\rangle \cdot \langle\Psi_{(i)}^+| \mathcal{G} |\Psi_{(i)}^+\rangle^{-1} \cdot \langle\Psi_{(i)}^+| \mathcal{G}, \quad Q_i = 1 - \mathcal{P}_i$$

läßt sich dann wie bei der Herleitung der Gleichung (8.4) zeigen, daß

¹⁾ Der Satz von Operatoren (Super-Vektoren) $|\Psi_{(i)}^+\rangle$ soll so gewählt sein, daß die in (9.1) auftretende Matrix-Inverse existiert.

$$(9.3) \quad G_i(z) = \frac{1}{z - \Omega^{(i)}} + \frac{1}{z - \Omega^{(i)}} \cdot (\psi_{(i)}^+ | \overset{(0,1)}{S} L_i Q_i \frac{1}{z - Q_i L_i Q_i} Q_i L_i | \psi_{(i)}^+) \cdot \\ \cdot (\psi_{(i)}^+ | \overset{(0,1)}{S} | \psi_{(i)}^+)^{-1} \cdot G_i(z)$$

mit

$$(9.4) \quad \Omega^{(i)} = (\psi_{(i)}^+ | \overset{(0,1)}{S} L_i | \psi_{(i)}^+) \cdot (\psi_{(i)}^+ | \overset{(0,1)}{S} | \psi_{(i)}^+)^{-1}$$

gilt¹⁾. Fordert man jetzt von den noch vorzugebenden Operatoren L_i , daß die Relation

$$(9.5) \quad \overset{(0,1)}{S} L_i Q_i = L_i^+ Q_i^+ \overset{(0,1)}{S}$$

erfüllt ist, und setzt iterativ

$$(9.6) \quad L_{i+1} = Q_i L_i Q_i \quad ; \quad | \psi_{(i+1)}^+) = Q_i L_i | \psi_{(i)}^+)$$

an, dann läßt sich (9.3) auf die Form

$$(9.7) \quad G_i(z) = \frac{1}{z - \Omega^{(i)}} + \frac{1}{z - \Omega^{(i)}} \cdot G_{i+1}(z) \cdot \Delta_{i+1}^2 \cdot G_i(z) = \\ = \frac{1}{z - \Omega^{(i)} - G_{i+1}(z) \cdot \Delta_{i+1}^2}$$

umschreiben. Darin wurde abkürzend

$$(9.8) \quad \Delta_{i+1}^2 = (\psi_{(i+1)}^+ | \overset{(0,0)}{S} | \psi_{(i+1)}^+) \cdot (\psi_{(i)}^+ | \overset{(0,1)}{S} | \psi_{(i)}^+)^{-1}$$

gesetzt. In Gleichung (9.7) ist $G_i(z)$ durch die "Matrix nächst höheren Grades", $G_{i+1}(z)$ ausgedrückt. Durch Iteration von (9.7) erhält man eine Kettenbruch-Entwicklung für $G_i(z)$. Wählt man jetzt speziell

$$(9.9) \quad L_0 = \hat{H} \quad ; \quad | \psi_{(0)}^+) = | \psi^+) ,$$

dann überzeugt man sich wegen der Vertauschbarkeit von $\hat{H}$ mit $\overset{(0,1)}{S}$ und wegen (8.7) leicht davon, daß die Bedingung (9.5) erfüllt ist. Aus Gleichung (9.7) erhält man dann iterativ:

1) (9.3) ist eine sehr allgemeine Operator-Identität; vergl. Anhang (A4.24)

$$(9.10) \quad G(z) = \frac{1}{z - \Omega - \frac{1}{z - \Omega^{(1)} - \frac{1}{z - \Omega^{(2)} - \dots - \frac{1}{z - \Omega^{(n-1)} - G_n(z) \cdot \Delta_n^2} \cdot \Delta_{n-1}^2}} \cdot \Delta_2^2 \cdot \Delta_1^2} .$$

Diese Kettenbruch-Entwicklung für den Propagator $G(z)$ ist vollkommen analog zu der von Mori [11] angegebenen Entwicklung für Korrelationsfunktionen. (Allerdings benutzt Mori eine andere als die hier verwendete Spur-Metrik; vergl. Anhang A4.)

Wie schon erwähnt wurde, ist die Entwicklung (9.10) noch exakt; sie gilt für jedes Vielteilchen- (Boson oder Fermion)-System, weil noch keine Voraussetzungen über den Hamiltonoperator gemacht worden sind. Im konkreten Fall scheint die Entwicklung aber kaum Vorteile gegenüber der Dyson-Gleichung (8.8) zu bringen, weil die Ω^i und Δ_i^2 für $i \geq 2$ sehr unhandlich werden. Man kann (9.10) als Verallgemeinerung¹⁾ zu der Tatsache auffassen, daß man bei der Bildung der zeitlichen Ableitung der Green's Funktion auf Green's Funktionen immer höherer Ordnung stößt. Die Hierarchie der sich dabei ergebenden Gleichungen ist in (9.10) enthalten.

10. HARTREE-FOCK-APPROXIMATION (HFA)

In diesem Kapitel soll die wohlbekannte Hartree-Fock-Näherung aus mehreren Gründen noch einmal ausführlich diskutiert werden. Zum einen muß die Behauptung (8.10) noch verifiziert werden, zum anderen soll die "Selbstkonsistenz-Bedingung" in sehr einfacher Weise mit Hilfe der Identität (4.1) gewonnen werden, und schließlich wollen wir im nächsten Kapitel die "Paarbildung" in Vielteilchensystemen durch eine direkte Verallgemeinerung der HFA beschreiben.

¹⁾ Es sind noch keinerlei Voraussetzungen über den Hamiltonoperator gemacht.

Die Hartree-Fock-Näherung besteht darin, die Matrix $M(z)$ in der Dyson-Gleichung (8.8) zu vernachlässigen. Physikalisch bedeutet das die Vernachlässigung aller dynamischen Wechselwirkungseffekte in dem Vielteilchensystem; man berücksichtigt gewissermaßen nur den statischen Effekt, den die Anwesenheit aller anderen Teilchen auf den Zustand bzw. das Frequenzspektrum eines betrachteten Teilchens hat. Die physikalische Interpretation läßt sich noch deutlicher durchführen, wenn die HFA durch die Annahme

$$(10.1a) \quad Q \hat{H} |\psi^+\rangle \approx 0 \quad \text{bzw.}$$

$$(10.1b) \quad \boxed{\hat{H} |\psi^+\rangle \approx P \hat{H} |\psi^+\rangle = |\psi^+\rangle \cdot \Omega}$$

gemacht wird, bei der $M(z) \approx 0$ als Folge von (10.1a) erscheint. Vergleicht man nämlich (10.1b) mit der entsprechenden Gleichung für ein System von wechselwirkungsfreien Teilchen¹⁾ ($H = H^{(0)}$ Einteilchen-Anteil des großkanonischen Hamiltonoperators)

$$(10.2) \quad \hat{H}^{(0)} |\psi^+\rangle = |\psi^+\rangle \cdot (h^{(0)} - \mu) ,$$

so sieht man, daß in (10.1b) an die Stelle des Frequenzoperators ($h^{(0)} - \mu$) ein effektiver Hartree-Fock-Frequenzoperator Ω ($\hbar = 1$) getreten ist. Das Vielteilchenproblem wird in der Hartree-Fock-Näherung auf ein System wechselwirkungsfreier Teilchen reduziert, die sich in einem effektiven (durch die anderen Teilchen verursachten), äußeren Potential befinden.

Man kann die Spektralzerlegung

$$(10.3) \quad G^{HF}(z) = \sum_n |\varphi_n\rangle \frac{1}{z - \Omega_n} \langle \varphi_n|$$

für den Propagator (8.10) angeben, sobald das Eigenwertproblem²⁾

1) Vergl. Anhang A1, III.

2) Ω ist hermitesch, so daß man annehmen darf, daß die $\{|\varphi_n\rangle\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem im Einteilchen-Hilbertraum bilden.

$$(10.4) \quad \Omega |\varphi_n\rangle = \Omega_n |\varphi_n\rangle \text{ bzw. } \sum_n [\Omega_{12} - \Omega_n \delta_{12}] \langle 2 | \varphi_n \rangle = 0$$

gelöst ist. Die Matrixelemente von Ω (bezüglich irgendeiner Basis $\{|1\rangle\}$ im Einteilchen-Hilbertraum) ergeben sich für einen Vielteilchen-Hamiltonoperator:

$$(10.5) \quad H = H^{(1)} + H^{(2)} = \psi_1^\dagger (h_{12}^{(1)} - \mu \delta_{12}) \psi_2 + \frac{1}{2} \psi_1^\dagger \psi_2^\dagger h_{12,34}^{(2)} \psi_4 \psi_3$$

mit beliebiger Ein- und Zweiteilchen-Wechselwirkung¹⁾ aus Gleichung (A1.18) zu:

$$(10.6) \quad \Omega_{12} = h_{12}^{(1)} - \mu \delta_{12} + (h_{13,24}^{(2)} - \eta h_{34,24}^{(2)}) \langle n_{34} \rangle.$$

Der im letzten Term auftretende Erwartungswert $\langle n_{34} \rangle$ muß nun noch konsistent, d.h. im Rahmen der Näherung (10.1b), ausgerechnet werden²⁾. Das geschieht sehr einfach durch Anwendung der Identität (4.1):

$$(10.7) \quad \begin{aligned} \langle n_{34} \rangle &= \langle \psi_3^\dagger \psi_4 \rangle = \langle \psi_4^\dagger | \underline{\Omega} | \psi_3^\dagger \rangle = \langle \psi_4^\dagger | \frac{\bar{e}^{\beta \hat{H}}}{\eta \bar{e}^{\beta \hat{H}} + 1} \hat{S}^{(\eta,1)} | \psi_3^\dagger \rangle = \\ &= \langle \psi_4^\dagger | \frac{1}{\eta + e^{\beta \hat{H}}} \hat{S}^{(\eta,1)} | \psi_3^\dagger \rangle \\ &\approx \langle 4 | \frac{1}{\eta + e^{\beta \Omega}} | 3 \rangle = \sum_n \frac{\langle 4 | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | 3 \rangle}{\eta + e^{\beta \Omega_n}}. \end{aligned}$$

Die Eigenwertgleichung (10.4) für den effektiven Hartree-Fock-Frequenzoperator Ω läßt sich mit Hilfe der Gleichungen (10.6), (10.7) in sukzessiver Approximation lösen. (Man beginnt z.B. in (10.7) mit den Eigenwerten und -vektoren von $h^{(1)}$, berechnet sich dann mit den so gewonnenen $\langle n_{34} \rangle^{(0)}$ den ersten, verbesserten Satz von Eigenwerten und -vektoren ($\Omega_n^{(1)}$ und $|\varphi_n^{(1)}\rangle$) aus (10.4), setzt diesen in (10.7) ein und gewinnt $\langle n_{34} \rangle^{(1)}$, usw.)

Als konkretes Beispiel wollen wir noch ein Vielteilchensystem mit spin-

1) Die Kurzschrift mit Summationsabkommen ist im Anhang A1 erklärt.

2) Im Formalismus der Temperatur-Green's-Funktionen wird das mit Hilfe der sogenannten Frequenzsummation gemacht.

unabhängiger, nur vom Abstand der beiden Teilchen abhängigen Zweiteilchen-Wechselwirkung erwähnen, das einem äußeren Potential ausgesetzt ist. In "Ortsdarstellung" erhalten wir für den Hamiltonoperator

$$(10.8) \quad H = \sum_{\alpha} \int d\vec{x} \, \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{x}) \left\{ -\frac{1}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 - \mu + u_{\alpha}(\vec{x}) \right\} \psi_{\alpha}(\vec{x}) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d\vec{x} \int d\vec{y} \, \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{y}) v(|\vec{x}-\vec{y}|) \psi_{\beta}(\vec{y}) \psi_{\alpha}(\vec{x}),$$

die Matrixelemente des effektiven Hartree-Fock-Frequenzoperators Ω ¹⁾

$$(10.9) \quad \langle \vec{x}\alpha | \Omega | \vec{x}'\alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \left\{ \left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 - \mu + u_{\alpha}(\vec{x}) + \int d\vec{y} \, v(|\vec{x}-\vec{y}|) \langle N(\vec{y}) \rangle \right] \delta(\vec{x}-\vec{x}') + \right. \\ \left. - \eta \, v(|\vec{x}'-\vec{x}|) \langle \psi_{\alpha'}^{\dagger}(\vec{x}') \psi_{\alpha}(\vec{x}) \rangle \right\}$$

und die Gleichung (10.4) zur Bestimmung der Eigenfunktionen und Eigenwerte von Ω

$$(10.10) \quad \left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 - \mu + u_{\alpha}(\vec{x}) + \int d\vec{y} \, v(|\vec{x}-\vec{y}|) \langle N(\vec{y}) \rangle \right] \varphi_n(\vec{x}, \alpha) + \\ - \eta \int d\vec{x}' \, v(|\vec{x}'-\vec{x}|) \langle \psi_{\alpha'}^{\dagger}(\vec{x}') \psi_{\alpha}(\vec{x}) \rangle \varphi_n(\vec{x}', \alpha) = \Omega_n \varphi_n(\vec{x}, \alpha)$$

mit

$$(10.11) \quad N(\vec{y}) = \sum_{\beta} \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{y}) \psi_{\beta}(\vec{y}) \quad \text{Operator der Teilchendichte am Ort } \vec{y} \text{ } ^{2)}$$

und wegen (10.7):

$$(10.12) \quad \langle \psi_{\alpha'}^{\dagger}(\vec{x}') \psi_{\alpha}(\vec{x}) \rangle = \sum_n \frac{\varphi_n(\vec{x}, \alpha) \varphi_n^*(\vec{x}', \alpha')}{\eta + e^{\beta \Omega_n}}.$$

1) Siehe Anhang A1.

2) Bei Benutzung der großkanonischen Form des Dichteoperators ist $\langle N(\vec{y}) \rangle$ eine Funktion von μ und kann nicht mit der Teilchendichte identifiziert werden.

11. ERWEITERTER SATZ VON OPERATOREN (PAARAPPROXIMATION)

In Kapitel 8 wurde ohne jegliche Voraussetzungen über den Hamiltonoperator eine Dyson-Gleichung für den Propagator $G(z)$ hergeleitet:

$$(11.1a) \quad G(z) = \frac{1}{z - \Omega - M(z)}$$

mit dem Hartree-Fock-Frequenzoperator

$$(11.1b) \quad \Omega = \langle \psi^+ | \hat{S}^{(q,1)} \hat{H} | \psi^+ \rangle = h^{(q)} - \mu + \langle \psi^+ | \hat{S}^{(q,1)} \hat{H}^{(q)} | \psi^+ \rangle$$

und der "dynamischen Selbstenergie"¹⁾

$$(11.1c) \quad M(z) = \langle \psi^+ | \hat{S}^{(q,1)} \hat{H} Q \frac{1}{z - Q \hat{H} Q} Q \hat{H} | \psi^+ \rangle = \\ = \langle \psi^+ | \hat{H}^{(2)} Q^+ \hat{S}^{(q,1)} \frac{1}{z - Q \hat{H} Q} Q \hat{H}^{(2)} | \psi^+ \rangle.$$

Im vorigen Kapitel haben wir dann in eben derselben Allgemeinheit gezeigt, daß die Vernachlässigung der dynamischen Wechselwirkungseffekte, verkörpert durch $M(z)$, auf ein selbstkonsistentes System von Gleichungen (10.3), (10.4), (10.6), (10.7) zur Bestimmung des Propagators führt.

In (11.1b) kann man den Zuwachs gegenüber einem System wechselwirkungsfreier Teilchen als ein effektives Feld zum Hamiltonoperator für das einzelne Teilchen $h_{\text{eff}}^{(q)} = h^{(q)} + \langle \psi^+ | \hat{S}^{(q,1)} \hat{H}^{(2)} | \psi^+ \rangle$ hinzunehmen. Denkt man z.B. an ein System von Elektronen mit Coulomb-Wechselwirkung, dann bewegt sich jedes Elektron in einem mittleren Potential - erzeugt durch die Ladungen aller anderen Elektronen.

Neben diesem statischen Effekt gibt es eine Reihe von interessanten dynamischen Effekten, die man alle durch geeignete Approximation der "dynamischen Selbstenergie" $M(z)$ beschreiben kann. Einen solchen Einfluß der dynamischen Wechselwirkungen (z.B. "Stöße") der Teilchen untereinander haben wir bereits im Kapitel 8 erwähnt: es ist die endliche Lebensdauer

¹⁾ In der Literatur wird der zweite Term in (11.1b) als (selbstkonsistenter) Hartree-Fock-Term in die sogenannte "proper self-energy" genommen.

der sogenannten "Einteilchen-Anregungen" [7]. In Hartree-Fock-Approximation ergibt sich als Spektralfunktion (für ein homogenes System) aus (8.11) mit (10.1b):

$$(11.2) \quad K^{(\eta)}(\vec{k}, \epsilon; \omega) \stackrel{\text{HFA}}{=} 2\pi \delta(\omega - \Omega_{\epsilon}(\vec{k})),$$

(vergl. A1.40a) die typische δ -Funktion, d.h. unendliche Lebensdauer der Einteilchen-Anregungen. Berücksichtigt man die durch dynamische Wechselwirkungen bedingte, endliche Lebensdauer der Anregungszustände, was sich z.B. durch die Hinzunahme von $M(\mathbf{z})$ in der Born-Approximation erreichen läßt [7], so bekommt man anstelle von (11.2) eine Lorentzlinie vom Typ (8.17)¹⁾ für die Spektralfunktion.

Im oben benutzten Bild des "effektiven Feldes" bewirkt der eben erwähnte dynamische Vielteilchen-Effekt (Born-Kollisions-Approximation), daß zu den Eigenzuständen von $\hat{h}_{\text{eff}}^{(0)}$ keine scharfen Energien sondern Energieniveaus endlicher Breite gehören.

Wir wollen uns hier nicht weiter mit Linienbreiten-Effekten beschäftigen, die man auf Wechselwirkungen zwischen Quasiteilchen zurückführen kann, und die durch entsprechende Störungsrechnung (Entwicklung nach Potenzen der Wechselwirkung) aus $M(\mathbf{z})$ hervorgehen.

Unser Interesse gilt vielmehr einer Klasse von Phänomenen (z.B. der Supraleitung in Metallen oder der Superfluidität des flüssigen Heliums), die auf der sogenannten "Paarbildung" in Vielteilchen-Systemen beruhen. Es ist bekannt, daß die Beschreibung des dynamischen Effekts der "Paarbildung" mit Hilfe einer üblichen Störungsentwicklung von $M(\mathbf{z})$ nicht gelingt. Die Darstellung (11.1c) der "dynamischen Selbstenergie" $M(\mathbf{z})$ als Superoperator-"Matrixelement" legt nun eine Methode der Approximation nahe, die immer auf "störungstheoretisch nicht erreichbare" Ergebnisse führt, und andererseits aber - im Gegensatz zu der im Kapitel 9 geschilderten Kettenbruchentwicklung - unbedingt erforderlichen Spielraum für zusätzliche physikalische Argumentation läßt. (An dieser Stelle sollte noch einmal erwähnt werden, daß im Kapitel 8,9 und auch hier ein

¹⁾ Gl. (8.17) ist natürlich nur eine Lorentzlinie für frequenzunabhängiges $\mathbf{f}$ und Δ .

sehr allgemeiner Vielteilchen-Hamiltonoperator benutzt wird.) Die oben erwähnte Methode besteht nun darin, den nicht-hermiteschen Projektor Q in (11.1c) durch einen nach physikalischen Erwägungen ausgesuchten Projektor $\mathcal{P}_{\text{eff}}$ zu ersetzen. Dabei ist für die praktische Rechnung besonders wichtig, daß an die Stelle der schwer traktablen Negationsform $Q = 1 - \mathcal{P}$ ein konstruktiver Projektor tritt.¹⁾

Wir wollen das Vorgehen an folgendem Beispiel demonstrieren:

$$(11.3) \quad Q \longrightarrow \mathcal{P}_{\text{eff}} = |\psi\rangle \cdot \langle\psi| \hat{G}^{(q)} \quad \text{mit} \quad \mathcal{P}_{\text{eff}} \mathcal{P} = 0 = \mathcal{P} \mathcal{P}_{\text{eff}},$$

bei dem man die Projektion Q auf den ganzen zu $\mathcal{P}|\psi\rangle$ komplementären Raum durch die Projektion $\mathcal{P}_{\text{eff}}$ auf eine Teilmenge der komplementären Vektoren ersetzt. Es ist einleuchtend, daß die auf diese Weise erzielten Ergebnisse nicht durch Störungsrechnungen endlicher Ordnung zu bekommen sind, weil man ja in einem gewissen Teilraum exakt rechnet.

Setzt man obigen Projektor $\mathcal{P}_{\text{eff}}$ in (11.1) ein, so erhält man für den Propagator:

$$(11.4) \quad G(z) \cong \frac{1}{z - \Omega + \Delta \cdot \frac{1}{z + \Omega^*} \cdot \Delta^*}$$

mit

$$(11.5) \quad \Delta_{12} = \eta (\psi_1^+ | \hat{G}^{(q)} | \psi_2) = h_{12;34}^{(2)} \langle \psi_4 | \psi_3 \rangle.$$

(Der Stern $*$ bezeichnet die Matrix der konjugiert-komplexen Elemente, d.h. es ist $(\Delta^*)_{12} = (\Delta_{12})^*$.)

Die Matrixelemente (11.5) des sogenannten "Gap-Operators" Δ werden im Anhang (A1.36ff) berechnet. Wie man mit Hilfe von (A1.30) einsieht, kann Δ nur dann von Null verschieden sein, wenn der Hamiltonoperator einen (wenn auch infinitesimal kleinen) Anteil $H_{(q)}$ enthält, der die Teilchenzahl nicht erhält.²⁾ Wir befinden uns mit der sogenannten "Paarampli-

1) "Konstruktiv" wollen wir einen Projektor der Form $\mathcal{P} = |x\rangle \cdot \langle y|x\rangle^{-1} \cdot \langle y|$ nennen.

2) Die hier getroffene Wahl für $H_{(q)}$ ist im Anhang A1 (VII) angegeben.

tude $\langle \psi_4 \psi_3 \rangle$ in einer ähnlichen Situation wie mit der spontanen Magnetisierung in einem isotropen Heisenberg-Magneten (vergl. Kap. 13). Die Symmetrie $[H, N] = 0$ des Hamiltonoperators würde nach (A1.30) $\Delta = 0$ zur Folge haben; wird diese Symmetrie durch ein infinitesimales $H_{(q)}$ gebrochen, so kann die "Paaramplitude" für Temperaturen $T < T_c$ von Null verschieden sein - und zwar nimmt sie unabhängig von dem infinitesimalen $H_{(q)}$ endliche Werte an (siehe "Gap-Equation" weiter unten). Bogoliubov [12] hat die mit den Symmetrien des Hamiltonoperators verknüpften "Entartungen des statistischen Gleichgewichtszustands" ausführlich diskutiert. Wir wollen deshalb hier nicht näher darauf eingehen, sondern nur erwähnen, daß wegen Gl. (A1.33) der symmetriebrechende Zusatzterm $H_{(q)}$ nie explizit in den Gleichungen für $G(z)$, Ω und Δ auftritt.

Inzwischen sind die physikalischen Gründe für die Wahl (11.3) von $\mathcal{P}_{\text{eff}}$ deutlich geworden. "Paaramplituden", die in der Hartree-Fock-Approximation vernachlässigt werden, treten gerade in Skalarprodukten der Form (11.5) auf, in denen der Liouvilleoperator $\hat{H}$ des Systems die orthogonalen¹⁾ Kets $|\psi\rangle$ und $\hat{S}^{(q)}|\psi^+\rangle$ verknüpft.

Wir wollen nun zeigen, daß sich die "Paarbildung" sehr übersichtlich und zwanglos in den Formalismus einbauen läßt, wenn man von vornherein auch Korrelationsfunktionen vom Typ $\langle \psi_i | \hat{R}^{(q,n)}(t) | \psi_j \rangle$ in die Untersuchung einbezieht.

Dazu gehen wir wieder von dem (Super-)Propagator $G(z)$ aus, betrachten aber jetzt seine (Super-)Matrixelemente bezüglich eines erweiterten Satzes von Operatoren:

$$(11.6) \quad |\Psi\rangle = \{ |\psi^+\rangle, |\psi\rangle \}$$

Anstelle des gewöhnlichen Propagators $G(z)$ bekommen wir dementsprechend den 2x2-Matrix-Propagator

$$(11.7) \quad \begin{aligned} \mathbb{G}(z) &\equiv (\Psi | \hat{S}^{(q)} \frac{1}{z - \hat{H}} | \Psi) \cdot (\Psi | \hat{S}^{(q)} | \Psi)^{-1} = \\ &= \begin{pmatrix} G(z) & F(z) \\ -F^*(-z^*) & -G^*(-z^*) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

1) Die Orthogonalität folgt aus den Vertauschungseigenschaften:

$$(\psi_1^+ | \hat{S}^{(q)} | \psi_2) = \langle [\psi_1, \psi_2]_q \rangle = 0.$$

mit $G(z) = [G(z)]_{++}$ in der üblichen Bedeutung (7.2) und:

$$(11.8) \quad F(z) \equiv \eta(\psi^+ | \hat{S} \frac{1}{z - \hat{H}} | \psi) = [G(z)]_{+-}.$$

Aufgrund der Vertauschungsrelationen für Feldoperatoren verifiziert man leicht:

$$(11.9) \quad (\Psi | \hat{S} | \Psi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \eta \end{pmatrix} = (\Psi | \hat{S} | \Psi)^{-1}.$$

Für den 2x2-Matrix-Propagator $G(z)$ lassen sich ohne neue Rechnung die Überlegungen (9.1), (9.2), (9.3) übernehmen¹⁾.

Mit

$$(11.10) \quad \mathcal{P} = |\Psi\rangle \cdot (\Psi | \hat{S} | \Psi)^{-1} \cdot (\Psi | \hat{S} = |\psi^+\rangle \cdot (\psi^+ | \hat{S} + |\psi\rangle \cdot (\psi | \hat{S}$$

und $Q - 1 - \mathcal{P}$ erhalten wir die Dyson-Gleichung

$$(11.11) \quad G(z) = \frac{1}{z - \Omega - M(z)}$$

mit

$$(11.12a) \quad \Omega = (\Psi | \hat{S} \hat{H} | \Psi) \cdot (\Psi | \hat{S} | \Psi)^{-1} = \\ = \begin{pmatrix} \Omega & \Delta \\ -\Delta^* & -\Omega^* \end{pmatrix},$$

$$(11.12b) \quad [\Omega]_{++} = \Omega = (\psi^+ | \hat{S} \hat{H} | \psi^+),$$

$$(11.12c) \quad [\Omega]_{+-} = \Delta = \eta(\psi^+ | \hat{S} \hat{H} | \psi),$$

$$(11.13) \quad M(z) = (\Psi | \hat{S} \hat{H} Q \frac{1}{z - Q \hat{H} Q} Q \hat{H} | \Psi) \cdot (\Psi | \hat{S} | \Psi)^{-1}.$$

Nun hat der 2x2-Matrix-Propagator in der Form (11.11) die angenehme Eigenschaft, daß sich die Inverse auf der rechten Seite ganz allgemein nach der Formel

1) Siehe auch die in (A4.24) hergeleitete Identität.

$$(11.14) \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \text{ mit } \begin{aligned} \alpha &= [A - BD^{-1}C]^{-1}; & \beta &= -\alpha BD^{-1} \\ \gamma &= -\delta CA^{-1}; & \delta &= [D - CA^{-1}B]^{-1} \end{aligned}$$

berechnen läßt. (Darin seien A, D quadratische Matrizen, deren Inverse existieren.) Für den uns interessierenden gewöhnlichen Propagator $G(z)$ bekommen wir so

$$(11.15) G(z) = \frac{1}{z - \Omega - M^+(z) - (\Delta + M^+(z)) \cdot \frac{1}{z + \Omega^* - M^-(z)} \cdot (-\Delta^* + M^-(z))}$$

und für den anomalen Propagator :

$$(11.16) F(z) = G(z) \cdot (\Delta + M^+(z)) \cdot \frac{1}{z + \Omega^* - M^-(z)} .$$

Der Ausdruck (11.15) für $G(z)$ ist exakt wie der frühere (11.1a); er ist allerdings wesentlich besser als Ausgangspunkt für Approximationen geeignet, wenn man den dynamischen Effekt der "Paarbildung" mit einbeziehen muß.

Ein Vergleich zeigt, daß man aus (11.15) die Approximation (11.4) für $M(z) \approx 0$ wiedergewinnt.

Im Rahmen der hier benutzten 2x2-Matrix-Propagatoren läßt sich die Näherung (11.4) (bzw. $M(z) \approx 0$) als direkte Verallgemeinerung der im Kapitel 10 besprochenen Hartree-Fock-Näherungsmethode darstellen¹⁾:

$$(11.17a) \quad \langle \Psi | \hat{H} Q^+ \approx 0$$

bzw.

$$(11.17b) \quad \boxed{\langle \Psi | \hat{H} \approx \langle \Psi | \hat{H} \mathcal{P}^+ = \Omega \cdot \langle \Psi |} .$$

Wie schon bei der HFA (Kap. 10) eignet sich die Quasi-Eigenvektorgleichung (11.17b) besonders gut, um mit Hilfe der Identität (4.1) die sogenannten "Konsistenzgleichungen" aufzustellen. In (A1.36) (bzw. in (10.6) und (11.5)) sind die Matricelemente von Ω für einen Hamiltonoperator

1) Wir haben hier anstelle der Ket-Gleichungen die vollkommen äquivalenten Bra-Gleichungen benutzt, weil sonst in (11.17b) die Matrix $\Omega^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \eta \end{pmatrix} \cdot \Omega \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \eta \end{pmatrix}$ auftreten würde.

mit allgemeiner Zweiteilchen-Wechselwirkung ausgeschrieben. Die darin enthaltenen Erwartungswerte müssen nun "selbstkonsistent" (d.h. im Rahmen der Näherung (11.17b)) berechnet werden. Dazu verallgemeinern wir (10.7) zu

$$(11.18) \quad \mathcal{N} \equiv (\Psi | \underline{\mathcal{G}} | \Psi) \cdot (\Psi | \underline{\mathcal{G}}^{(0)} | \Psi)^{-1} = \begin{pmatrix} \mathcal{N} & \pi \\ \eta \pi^+ & (\eta - \mathcal{N}^*) \end{pmatrix}$$

mit

$$(11.19a) \quad \mathcal{N} \equiv (\psi^+ | \underline{\mathcal{G}} | \psi^+), \quad (11.19b) \quad \pi \equiv \eta (\psi^+ | \underline{\mathcal{G}} | \psi).$$

In der Näherung (11.17) bekommt man aus (11.18) mit der Identität (4.1) die "Konsistenzgleichung"

$$(11.20) \quad \mathcal{N} = (\Psi | \frac{\underline{\mathcal{G}}^{(0)}}{\eta + e^{\beta \Omega}} | \Psi) \cdot (\Psi | \underline{\mathcal{G}}^{(0)} | \Psi)^{-1} \cong \frac{1}{\eta + e^{\beta \Omega}},$$

oder - nach einer identischen Umformung ($\eta = \pm 1$) -

$$(11.21) \quad \mathcal{N} \cong \frac{1}{\eta + e^{\beta \Omega}} = \frac{1}{2\eta} \{ 1 - [\tanh(\frac{\beta}{2} \Omega)]^\eta \},$$

eine für manche Anwendungen günstige Form. Durch Inversion der 2x2-Matrix in (11.20) kann man auch $\mathcal{N}$ und π direkt angeben:¹⁾

$$(11.22a) \quad \mathcal{N} \cong \frac{1}{\eta + [e^{\beta \Omega}]_{++} - [e^{\beta \Omega}]_{+-} \cdot \frac{1}{\eta + [e^{\beta \Omega}]_{--}} \cdot [e^{\beta \Omega}]_{-+}}$$

$$(11.22b) \quad \pi \cong -\mathcal{N} \cdot [e^{\beta \Omega}]_{+-} \cdot \frac{1}{\eta + [e^{\beta \Omega}]_{--}}.$$

Die Gleichungen (11.22) (bzw. (11.20) oder (11.21)) bilden zusammen mit

$$(11.23a) \quad \Omega_{12} = h_{12}^{(0)} - \mu \delta_{12} + (h_{13;24}^{(2)} - \eta h_{13;+2}^{(2)}) \mathcal{N}_{+3},$$

¹⁾ Bei der tatsächlichen Rechnung wird man (11.22) als Gleichungssystem analog zu (11.24b) ausdrücken und dabei wegen $\alpha \ll \omega$ die Laplace-Rücktransformation $\tilde{G}(\beta) \equiv e^{\beta \Omega} \cong \mathcal{L}^{-1}\{G(\epsilon)\}_\beta$ einführen: $[\eta \mathbf{1} + \tilde{G}(\beta)] \cdot \mathcal{N} = \mathbf{1}$, (siehe auch Kap. 12).

$$(11.23b) \quad \Delta_{12} = \eta \, h_{12;34}^{(\omega)} \, \pi_{34}$$

ein (äußerst kompliziertes) selbstkonsistentes System zur Bestimmung von Ω und Δ .

Bevor dieses Gleichungssystem im nächsten Kapitel für den relativ einfachen Fall eines homogenen Systems (räumliche und Spin-Homogenität) untersucht wird, wollen wir jetzt die Approximation (11.17), d.h.

$$(11.24a) \quad \boxed{G_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{z}) \cong \frac{1}{\mathbf{z} - \Omega} \quad \text{bzw.} \quad (\mathbf{z} - \Omega) \cdot G_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{z}) \cong 1,}$$

in der gewohnten Weise durch ein Gleichungssystem für den gewöhnlichen und den anomalen Propagator, $G(\mathbf{z})$ bzw. $F(\mathbf{z})$, darstellen. Mit den Definitionen (11.7) und (11.12a) erhält man aus der Näherung (11.24a) die Gleichungen:

$$(11.24b)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{z} \, G_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\mathbf{r}}(\mathbf{\tilde{x}}, \mathbf{\tilde{x}}'; \mathbf{z}) - \sum_{\mathbf{\tilde{p}}} \int d\mathbf{\tilde{y}} \left\{ \langle \mathbf{\tilde{x}}_A | \Omega | \mathbf{\tilde{y}} \mathbf{p} \rangle G_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\mathbf{r}}(\mathbf{\tilde{y}}, \mathbf{\tilde{x}}'; \mathbf{z}) - \langle \mathbf{\tilde{x}}_A | \Delta | \mathbf{\tilde{y}} \mathbf{p} \rangle F_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^*(\mathbf{\tilde{y}}, \mathbf{\tilde{x}}'; -\mathbf{z}^*) \right\} &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta(\mathbf{\tilde{x}} - \mathbf{\tilde{x}}'), \\ \mathbf{z} \, F_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^*(\mathbf{\tilde{x}}, \mathbf{\tilde{x}}'; -\mathbf{z}^*) + \sum_{\mathbf{\tilde{p}}} \int d\mathbf{\tilde{y}} \left\{ \langle \mathbf{\tilde{x}}_A | \Omega | \mathbf{\tilde{y}} \mathbf{p} \rangle^* F_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^*(\mathbf{\tilde{y}}, \mathbf{\tilde{x}}'; -\mathbf{z}^*) - \langle \mathbf{\tilde{x}}_A | \Delta | \mathbf{\tilde{y}} \mathbf{p} \rangle^* G_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\mathbf{r}}(\mathbf{\tilde{y}}, \mathbf{\tilde{x}}'; \mathbf{z}) \right\} &= 0. \end{aligned}$$

Die hier einzutragenden Matrixelemente von Ω und Δ sind für einen Hamiltonoperator mit allgemeiner Ein- und spinunabhängiger Zweiteilchen-Wechselwirkung in (A1.38) angegeben.¹⁾

Für ein System von Fermionen (Elektronen mit Ladung $q = -e$ und Spins $s = 1/2$) im äußeren Magnetfeld (Vektorpotential $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{\tilde{x}})$) und einem attraktiven, singulären Zweiteilchen-Potential der Form

$$(11.25) \quad v(\mathbf{\tilde{x}}; \mathbf{\tilde{x}}') = -g \delta(\mathbf{\tilde{x}} - \mathbf{\tilde{x}}')$$

stellen die Gleichungen (11.24) die "Gorkov-Gleichungen" zur mikroskopischen Beschreibung der Supraleitung dar. (Vergl. z.B. [8], [13])

¹⁾ Wegen der Selbstkonsistenz-Bedingungen vergl. Fußnote 1), S. 35

12. SUPRALEITUNG UND SUPERFLUIDITÄT

Im vorigen Kapitel wurde eine ganz allgemeine Darstellung der sogenannten "Paarbildung" in Vielteilchen-(Bosonen oder Fermionen)Systemen gegeben. Es bleibt nun noch das Problem, eine Lösung des komplizierten, selbstkonsistenten Gleichungssystems (11.22), (11.23) für vorgegebene Ein- und Zweiteilchen-Wechselwirkung zu finden. Wir beschränken uns hier darauf zu zeigen, daß sich die Gleichungen des vorigen Kapitels für ein homogenes System¹⁾ auf die in der Literatur bekannten mikroskopischen Beschreibungen der Supraleitung (BCS-Theorie, Gorkov-Gleichungen), des superfluiden He³ (siehe z.B. V.J. Emery [14]) und der Boson-Superfluidität (W.A.B. Evans und Y. Imry [15]) reduzieren lassen.

Nach (A1,VII) gilt für ein homogenes System:

$$(12.1a) \quad \langle \vec{k}\sigma | \Omega | \vec{k}'\sigma' \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \Omega_{\sigma}(\vec{k}) ,$$

$$(12.1b) \quad \langle \vec{k}\sigma | \Delta | \vec{k}'\sigma' \rangle = \delta_{\vec{k},-\vec{k}'} \delta_{\sigma,-\sigma'} \Delta_{\sigma}(\vec{k})$$

mit den in (A1.40) angegebenen Diagonalelementen. Der gesuchte Propagator $G(\vec{z})$, (11.4), ist dann ebenfalls diagonal:

$$(12.2a) \quad \langle \vec{k}\sigma | G(\vec{z}) | \vec{k}'\sigma' \rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} G_{\sigma}(\vec{k}; \vec{z})$$

mit

$$(12.2b) \quad G_{\sigma}(\vec{k}; \vec{z}) = \frac{\vec{z} + \Omega_{\sigma}(\vec{k})}{(\vec{z} - \Omega_{\sigma}(\vec{k}))(\vec{z} + \Omega_{\sigma}(\vec{k})) - \eta |\Delta_{\sigma}(\vec{k})|^2} .$$

Die Diskussion der Selbstkonsistenz-Gleichung (11.21) vereinfacht sich beträchtlich, wenn wir zunächst die zusätzliche Näherung²⁾

1) Damit ist hier neben der Translationsinvarianz $[H, \vec{P}] = 0$ auch die Invarianz im Spin-Raum gegenüber Drehungen um die z-Achse $[H, S^z] = 0$ gemeint.

2) In der Literatur wird diese Annahme über näherungsweise Zeitumkehr-Invarianz des HF-Frequenzoperators oft gemacht. Im Fall der Gorkov-Gleichungen wird z.B. auf den bei experimentellen Feldern $\lesssim 10^3$ Gauss verschwindend kleinen Einfluß des Pauli-Paramagnetismus der Elektronen

$$(12.3) \quad \Omega_{\sigma}(\vec{k}) - \Omega_{-\sigma}(-\vec{k}) = u_{\sigma} - u_{-\sigma} - \eta \sqrt{V} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) [\langle \psi_{\vec{k}_1}^{\dagger} \psi_{\vec{k}-\vec{k}_1} \rangle - \langle \psi_{-\vec{k}}^{\dagger} \psi_{-\vec{k}-\vec{k}_1} \rangle] \approx 0$$

machen, weil dann

$$(12.4) \quad \Omega^2 = \begin{pmatrix} (\Omega^2 - \Delta \cdot \Delta^*) & (\Omega \cdot \Delta - \Delta \cdot \Omega^*) \\ (\Omega \cdot \Delta - \Delta \cdot \Omega^*)^* & (\Omega^2 - \Delta \cdot \Delta^*)^* \end{pmatrix} \cong E^2$$

eine diagonale Matrix ist. Mit Hilfe der Formeln (A1.40) bekommt man:

$$(12.5) \quad E = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E^* \end{pmatrix} \text{ mit } \langle \vec{k} \sigma | E | \vec{k}' \sigma' \rangle = \delta_{\vec{k} \vec{k}'} \delta_{\sigma \sigma'} E_{\sigma}(\vec{k}) = \langle \vec{k} \sigma | E | \vec{k}' \sigma' \rangle^*,$$

und für das Energiespektrum:

$$(12.6) \quad \boxed{E_{\sigma}(\vec{k}) = \sqrt{\Omega_{\sigma}^2(\vec{k}) + |\Delta_{\sigma}(\vec{k})|^2}}.$$

Wegen (12.4) und (12.5) ist es günstig, die Konsistenzbedingung (11.21) mit Hilfe der Formel $A^2 = D^2 \rightarrow \tanh(\alpha A) = A D^{-1} \tanh(\alpha D)$ umzuschreiben:

$$(12.7) \quad \mathcal{M} = \frac{1}{2\eta} \left\{ 1 - [\Omega \cdot E^{-1} \cdot \tanh(\frac{\beta}{2} E)]^{\eta} \right\}.$$

(Wegen der Diagonalität von E lassen sich die Matrixelemente von $\mathcal{M}$ in der Impulsbasis leicht angeben.) Um eine bessere Übersicht zu haben, betrachten wir nun zunächst die

(I) Paarbildung in einem System von Fermionen.

Der Propagator (12.2b) wird unter Berücksichtigung von (12.3) zu

$$(12.8) \quad G_{\sigma}(\vec{k}; z) = \frac{z + \Omega_{\sigma}(\vec{k})}{z^2 - E_{\sigma}^2(\vec{k})} \text{ mit } E_{\sigma}(\vec{k}) = \sqrt{\Omega_{\sigma}^2(\vec{k}) + |\Delta_{\sigma}(\vec{k})|^2} \cong E_{\sigma}(\vec{k}),$$

darin ist (nach (A1.40) und der Definition (11.49))

$$(12.9) \quad \Omega_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{k^2}{2m} - \mu + u_{\sigma} + \tilde{v}(0) \sum_{\vec{k}_1, \sigma_1} \mathcal{N}_{\sigma_1}(\vec{k}_1) - \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) \mathcal{N}_{\sigma}(\vec{k}_1)$$

verwiesen (d.h. $u_{\sigma} - u_{-\sigma} \approx 0$), während die Hartree-Fock-Zusatzterme schon in $\Omega_{\sigma}(\vec{k})$ selbst vernachlässigt werden. Für den Fall, daß die Annahme (12.3) ungerechtfertigt ist, vgl. Bemerkungen am Ende dieses Kapitels (12.36).

$$(12.10) \quad \Delta_{\sigma}(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}-\vec{k}_1) \pi_{\sigma}(\vec{k}_1) .$$

$\mathcal{N}_{\sigma}(\vec{k})$ und $\pi_{\sigma}(\vec{k})$ sind die Diagonalelemente bzw. "Antidiagonal"-Elemente der Matrizen $\mathcal{N}$ und π , die nun aus der Konsistenzbedingung (12.7) berechnet werden. Für $\eta=+1$ ist

$$(12.11) \quad \mathcal{N} - \frac{1}{2} \cdot \mathbb{1} = -\frac{1}{2} \Omega \cdot E^{-1} \cdot \tanh\left(\frac{\beta}{2} E\right) ,$$

und man liest ab:

$$(12.12a) \quad \mathcal{N}_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \Omega_{\sigma}(\vec{k}) \frac{1}{E_{\sigma}(\vec{k})} \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k})\right) ,$$

$$(12.12b) \quad \pi_{\sigma}(\vec{k}) = -\frac{1}{2} \Delta_{\sigma}(\vec{k}) \frac{1}{E_{\sigma}(\vec{k})} \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k})\right) .$$

Die in (12.12a) zum Ausdruck kommende Veränderung des Hartree-Fock-Anteils in $\Omega_{\sigma}(\vec{k})$ wird - soweit mir bekannt - in der Literatur vernachlässigt. Setzt man $\pi_{\sigma}(\vec{k})$ in (12.10) ein, so erhält man die Gleichung für die Energielücke ("gap equation"):

$$(12.13) \quad \Delta_{\sigma}(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}-\vec{k}_1) \Delta_{\sigma}(\vec{k}_1) \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k}_1)\right)}{2 E_{\sigma}(\vec{k}_1)} .$$

An dieser Stelle müssen wir daran erinnern, daß neben der Homogenität noch keine weiteren Voraussetzungen (von (12.3) abgesehen) über den Hamiltonoperator des Fermionen-Systems gemacht worden sind. Die obigen Gleichungen beschreiben also die Paarbildung von Elektronen in einem Metall (Supraleiter) ebenso wie in anderen Fermionen-Systemen (z.B. Superfluidität des flüssigen He^3 [14]).

Insbesondere haben wir auch noch nicht über die spezielle Form des Zweiteilchen-Potentials verfügt. Wir werden aber gleich zeigen, daß keine nicht-triviale Lösung für $\Delta_{\sigma}(\vec{k})$ existiert, wenn das Zweiteilchen-Potential rein abstoßend (d.h. $v(\vec{x}) > 0$ für alle $\vec{x}$) ist. Ein nicht-triviales $\Delta_{\sigma}(\vec{k})$ setzt also voraus, daß anziehende Kräfte zwischen den Teilchen so wirken, daß wenigstens für gewisse gegenseitige Abstände $|\vec{x}|$ $v(\vec{x}) < 0$ wird.

Diese Notwendigkeit für einen attraktiven Teil im Zweiteilchen-Potential ist ein Grund für die anschauliche Bezeichnung "Paarbildung": der Erwartungswert $\langle \psi_1^\dagger \psi_2^\dagger \rangle$ kann nur von Null verschieden sein, wenn eine anziehende Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen vorhanden ist.

Der Beweis für die Notwendigkeit eines (teilweise) attraktiven Zweiteilchen-Potentials verläuft vollkommen analog zu dem in [16] für Bosonen gegebenen. Anstelle von (12.13) betrachtet man besser die äquivalente Gleichung für die "Paaramplitude" $\pi_{\sigma}(\vec{k})$ (Gleichung (12.10) in Gleichung (12.12b) einsetzen!):

$$(12.14) \quad 2E_{\sigma}(\vec{k}) \coth\left(\frac{\beta}{2}E_{\sigma}(\vec{k})\right) \pi_{\sigma}(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}-\vec{k}_1) \pi_{\sigma}(\vec{k}_1).$$

Multipliziert man hier auf beiden Seiten mit $\pi_{\sigma}^*(\vec{k})$ und summiert über $\vec{k}$, so bekommt man:

$$(12.15) \quad \sum_{\vec{k}} 2E_{\sigma}(\vec{k}) \coth\left(\frac{\beta}{2}E_{\sigma}(\vec{k})\right) |\pi_{\sigma}(\vec{k})|^2 = - \sum_{(V)} \int d\vec{x} v(|\vec{x}|) \left| \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{x}\cdot\vec{k}} \pi_{\sigma}(\vec{k}) \right|^2.$$

Diese Gleichung kann sicherlich nicht durch ein von Null verschiedenes $\pi_{\sigma}(\vec{k})$ erfüllt werden, wenn $v(|\vec{x}|) > 0$ für alle $\vec{x}$ gilt; denn die linke Seite von (12.17) ist immer positiv. In der Literatur werden Gorkov-Gleichungen und Energielücke-Gleichungen in der Regel unter Annahme eines attraktiven, singulären Potentials der Form¹⁾

$$(12.16) \quad v(|\vec{x}-\vec{x}'|) = -g \delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad \text{bzw.} \quad \tilde{v}(\vec{k}) = -g/v$$

hergeleitet. Damit ist $\Delta_{\sigma}(\vec{k}) = \Delta_{\sigma}$ unabhängig von $\vec{k}$, und man bekommt aus (12.13), wenn man noch die quasi-kontinuierliche Summe ($V \rightarrow \infty$) durch ein Integral ersetzt:

$$(12.17) \quad 1 = g \int \frac{d\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3}} \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega_{\sigma}^2(\vec{k}) + |\Delta_{\sigma}|^2}\right)}{2 \sqrt{\Omega_{\sigma}^2(\vec{k}) + |\Delta_{\sigma}|^2}}$$

In dieser Form findet man die Energielücke-Gleichung für ein homogenes System z.B. in [8], S. 446, Gleichung (51.36).

1) Bekanntlich läßt sich aus der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in einem Metall eine indirekte attraktive Wechselwirkung zwischen den Elektronen ableiten.

(II) Paarbildung in einem System von Bosonen ($\eta = -1$).

Der Propagator lautet in der Impulsdarstellung wie vorher:

$$(12.18) \quad G_{\sigma}(\vec{k}; z) = \frac{z + \Omega_{\sigma}(\vec{k})}{z^2 - \Omega_{\sigma}^2(\vec{k})}, \quad \text{aber} \quad E_{\sigma}(\vec{k}) = \sqrt{\Omega_{\sigma}^2(\vec{k}) - |\Delta_{\sigma}(\vec{k})|^2} \cong E_{-\sigma}(-\vec{k}).$$

Darin ist (nach (A1.40) und der Definition (11.19)):

$$(12.19) \quad \Omega_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{k^2}{2m} - \mu + u_{\sigma} + \tilde{v}(\vec{\sigma}) \sum_{\vec{k}_1, \sigma_1} \mathcal{N}_{\sigma_1}(\vec{k}_1) + \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) \mathcal{N}_{\sigma}(\vec{k}_1)$$

und

$$(12.20) \quad \Delta_{\sigma}(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) \pi_{\sigma}(\vec{k}_1).$$

Die Konsistenzbedingung (12.7) lautet für Bosonen ($\eta = -1$):

$$(12.21) \quad \mathcal{N} + \frac{1}{2} \cdot 1 = \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\beta}{2} E\right) \cdot E \cdot \Omega^{-1},$$

woraus man abliest ($\langle \vec{k} \sigma | [\Omega^{-1}]_{++} | \vec{k} \sigma \rangle = \Omega_{\sigma}(\vec{k}) / E_{\sigma}^2(\vec{k})$ und $\langle \vec{k} \sigma | [\Omega^{-1}]_{+-} | -\vec{k} -\sigma \rangle = \Delta_{\sigma}(\vec{k}) / E_{\sigma}^2(\vec{k})$) :

$$(12.22a) \quad \mathcal{N}_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \frac{\Omega_{\sigma}(\vec{k})}{E_{\sigma}(\vec{k})} \coth\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k})\right) - \frac{1}{2}$$

$$(12.22b) \quad \pi_{\sigma}(\vec{k}) = \Delta_{\sigma}(\vec{k}) \frac{\coth\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k})\right)}{2 E_{\sigma}(\vec{k})}.$$

Setzt man auch hier (12.22b) in (12.20) ein, so bekommt man das Boson-Analogon zur Energielücke-Gleichung, in dem nur der $\coth\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k})\right)$ an die Stelle des $\tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{\sigma}(\vec{k})\right)$ in der Gleichung (12.13) tritt. Die Gleichungen (12.19) bis (12.22) entsprechen genau dem Ergebnis der Theorie von Evans und Imry ([16], Gleichungen (2.15), (2.16)).

Schreibt man anstelle der Konsistenz-Gleichung für $\Delta_{\sigma}(\vec{k})$ die äquivalente Gleichung für die Paaramplitude $\pi_{\sigma}(\vec{k})$ auf, indem (12.20) in (12.22b) eingesetzt wird¹⁾

1) Gleichung (3.1) und (3.2) in [16] enthalten offenbar einen Druckfehler; der $\coth$ müßte dort durch $\tanh$ ersetzt werden.

$$(12.23) \quad 2E_0(\vec{k}) \tanh\left(\frac{E_0(\vec{k})}{2}\right) \pi_0(\vec{k}) = - \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}-\vec{k}_1) \pi_0(\vec{k}_1),$$

so folgt wegen $E_0(\vec{k}) \tanh\left(\frac{E_0(\vec{k})}{2}\right) > 0$ mit den gleichen Argumenten wie in (12.15), daß das Zweiteilchen-Potential mindestens teilweise attraktiv sein muß, damit (12.24) eine nichttriviale Lösung besitzt.

Wir haben erwähnt, daß in den Supraleitungstheorien im allgemeinen die durch Paarbildung hervorgerufene Veränderung der Hartree-Fock-Energie vernachlässigt wird (Gleichung (12.12a)). Im Fall von Bosonen müssen unbedingt beide Gleichungen ((12.22a), (12.22b)) bei der selbstkonsistenten Berechnung von $E_0(\vec{k})$ berücksichtigt werden, weil es hier das Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation gibt: die Zahl $N_0(\vec{k})$ von Bosonen im Zustand $|\vec{k}0\rangle$ kann makroskopisch groß werden, d.h. $N_0(\vec{k}) \approx O(N)$. Bisher wurde in der Theorie noch kein Gebrauch von der makroskopischen Besetzungszahl des $\vec{k}=0$ -Zustandes gemacht, die in Bosonensystemen für $T < T_0$ vorliegt. Imry [16] hat die Rolle der Bose-Einstein-Kondensation innerhalb der vorliegenden Paarapproximation diskutiert und z.B. auf folgende Möglichkeit hingewiesen: ein Hartree-Fock-Bosonengas (Zweiteilchen-Potential vorhanden) kann Bose-Einstein-kondensieren ohne superfluid zu werden, d.h. ohne daß es zur Paarbildung kommt ($\Delta(\vec{k}) = 0$, z.B. bei rein repulsiver Wechselwirkung).

Wir wollen jetzt noch das Anregungsspektrum $E(\vec{k})$ für kleine k -Werte berechnen, das sich aus den Gleichungen (12.18) bis (12.22) für Bosonen mit Spin $S=0$ ergibt, wenn man sich in der superfluiden Phase befindet¹⁾:

$$(12.24a) \quad \Delta(\vec{k}) \neq 0 \quad \text{b) } N(\vec{k}=0) \approx O(N) \gg 1.$$

Aus der makroskopischen Größe von $N(0)$ folgt mit (11.22a), daß $E(\vec{k}=0)$ "makroskopisch klein" [16] sein muß, d.h.

$$(12.25) \quad \Omega^2(0) \approx |\Delta(0)|^2 \longrightarrow \Omega(0) = \pm |\Delta(0)|.$$

1) Man beachte, daß in der vorliegenden Theorie die "Bogoliubov-Vorschrift", d.h. die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für den $\vec{k}=0$ -Zustand durch c -Zahlen zu ersetzen, nicht benutzt wird.

Damit läßt sich im Rahmen der vorliegenden Näherung das chemische Potential μ aus (12.19) bestimmen ($u_0 = 0$) :

$$(12.26) \quad \mu = \tilde{v}(\vec{0}) \sum_{\vec{k}_1} \mathcal{N}(\vec{k}_1) + \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(-\vec{k}_1) \mathcal{N}(\vec{k}_1) - |\Delta(\vec{0})| ,$$

und man bekommt mit der Abkürzung

$$(12.27a) \quad \zeta(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}_1} [\tilde{v}(\vec{k}-\vec{k}_1) - \tilde{v}(-\vec{k}_1)] \mathcal{N}(\vec{k}_1) = \zeta(-\vec{k}) \quad 1)$$

$$(12.27b) \quad \zeta(\vec{k}) = -\frac{1}{2} \int_{(V)} d\vec{x} (\vec{k} \cdot \vec{x})^2 v(|\vec{x}|) \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \mathcal{N}(\vec{k}_1) ,$$

aus den Gleichungen (12.18), (12.19) das Anregungsspektrum:

$$(12.28) \quad E(\vec{k}) = \sqrt{\left\{ \frac{k^2}{2m} + \zeta(\vec{k}) + |\Delta(\vec{0})| \right\}^2 - |\Delta(\vec{k})|^2} .$$

Für kleine k -Werte erhält man daraus ein Phonon-Spektrum der Form

$$(12.29a) \quad E(\vec{k}) = \sqrt{\frac{|\Delta(\vec{0})|}{m^*}} k \equiv c k , \quad \text{für kleine } k ;$$

ferner erhalten wir für den Fall, daß $\Delta(\vec{k}) \equiv 0$ (das trifft nach (12.23) für ein rein repulsives Zweiteilchen-Potential, $v(|\vec{x}|) > 0$ für alle $\vec{x}$, zu) aus (12.28):

$$(12.29b) \quad E(\vec{k}) = \frac{k^2}{2m^*} , \quad \text{für kleine } k .$$

Darin ist die effektive Masse m^* durch die Gleichung

$$(12.30) \quad \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} - \int_{(V)} d\vec{x} \left(\frac{1}{k} \vec{k} \cdot \vec{x} \right)^2 v(|\vec{x}|) \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \mathcal{N}(\vec{k}_1)$$

definiert und (vergl. Gleichung (12.20)):

$$(12.31) \quad |\Delta(\vec{0})| = \left| \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(-\vec{k}_1) \pi(\vec{k}_1) \right| = \left| \int_{(V)} d\vec{x} v(\vec{x}) \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \pi(\vec{k}_1) \right| .$$

Die Funktionen $\mathcal{N}(\vec{k})$ und $\pi(\vec{k})$ bzw. $|\Delta(\vec{0})|$ müssen nun noch unter der Voraussetzung $\mathcal{N}(\vec{0}) \approx O(N) \gg 1$ aus dem Gleichungssystem (12.18) bis (12.22) bestimmt werden. Wir wollen uns hier auf die Näherung

1) Hier wurde Zeitumkehrinvarianz des Systems vorausgesetzt, was $\mathcal{N}(\vec{k}) = \mathcal{N}(-\vec{k})$ zur Folge hat.

$$(12.32) \quad \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \mathcal{N}(\vec{k}_1) \approx \frac{N}{V} \approx \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \Pi(\vec{k}_1)$$

beschränken, die zutrifft, wenn man $\mathcal{N}(k > k_{\max}) \approx 0$; $\Pi(k > k_{\max}) \approx 0$ und $\Omega(k < k_{\max}) \approx |\Delta(k < k_{\max})|$ setzen kann und für den Abschneideimpuls $k_{\max}$ die Bedingung

$$(12.33) \quad k_{\max} a \ll 1 \quad \text{mit} \quad a^2 = \frac{\int d\vec{x} |\vec{x}|^2 v(|\vec{x}|)}{\int d\vec{x} v(|\vec{x}|)}$$

erfüllt ist. Darin charakterisiert a die Reichweite der Wechselwirkung $v(|\vec{x}|)$. Mit (12.32) bekommt man dann:

$$(12.34a) \quad \frac{1}{m^*} \cong \frac{1}{m} \left(1 - \frac{n}{3} \frac{V \tilde{v}(\vec{0})}{m a^2} \right),$$

$$(12.34b) \quad |\Delta(\vec{0})| \cong n |V \tilde{v}(\vec{0})| \quad \text{mit} \quad n = N/V \quad \text{Teilchendichte.}$$

Die Resultate (12.29) beruhen allein auf der Paarapproximation und der zusätzlichen Annahme $\mathcal{N}(\vec{0}) \gg 1$. Sie lassen folgende Schlußfolgerung zu:

a. Für ein rein attraktives Zweiteilchen-Potential ($\rightarrow \tilde{v}(\vec{0}) < 0$) ist die Schallgeschwindigkeit c in (12.29a) immer reell ($m^* > 0$, weil $V \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \mathcal{N}(\vec{k}_1) \geq 0$ und $v(|\vec{x}|) < 0$ für alle $\vec{x}$).

b. Für ein rein repulsives Zweiteilchen-Potential ($\Delta(\vec{0}) = 0$) wird das System nicht superfluid; wir haben es dann mit einem Bose-kondensierten Hartree-Fock-Gas zu tun, dessen Anregungsspektrum (12.29b) sich in der vorliegenden Paarapproximation nicht qualitativ von dem für $T > T_0$ unterscheidet. (Die in (12.34a) berechnete effektive Masse m^* stimmt genau mit der in [8], S. 260, Gleichung (28.11), für ein Hartree-Fock-Gas oberhalb T_0 angegebenen überein.)

Die Folgerungen a. und b. stehen beide im Widerspruch zu der Theorie von Bogoliubov¹⁾, in der man die sogenannte "Kondensatwellenfunktion" $\langle \psi(\vec{x}) \rangle$ anstelle unserer Paaramplitude Π einführt und die wenig einleuchtende Ersetzung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des $\vec{k} = \vec{0}$ -Zustandes

1) In der Bogoliubov-Theorie wird c imaginär für $\tilde{v}(\vec{0}) < 0$, während die Theorie für ein rein repulsives Potential ($\rightarrow \tilde{v}(\vec{0}) > 0$) "Superfluidität" zuläßt. Vergl. z.B. Gross-Pitaevskii-Gleichung in [8] S. 496, Gl. (55.46), in der ein rein repulsives Potential angenommen wird.

durch c-Zahlen vornimmt. In der vorliegenden Theorie wurde dagegen nur die Tatsache ausgenutzt, daß $M(\vec{k}=\vec{0})$ makroskopisch groß ist, um das Phonon-spektrum (12.29a) zu bekommen. Ansonsten fügt sich das Phänomen Superfluidität ganz zwanglos in den übergeordneten Rahmen der Paarbildung in Vielteilchen-Systemen, der im Kapitel 11 behandelt wurde. Wir erwähnen noch, daß die Bewegungsgleichungen (11.24b) für den gewöhnlichen und den anomalen Propagator eine direkte Verallgemeinerung der entsprechenden Gleichungen in der Bogoliubov-Theorie sind. Wir entnehmen mit Hilfe von (A1.38a) für ein System von Bosonen mit Spin $S=0$ aus (11.24b):

$$(12.35a) \quad \left\{ \vec{z} + \frac{1}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 + \mu - u(\vec{x}) - \int d\vec{y} \, v(\vec{x}-\vec{y}) \langle N(\vec{y}) \rangle \right\} G(\vec{x}, \vec{x}'; \vec{z}) + \\ - \int d\vec{y} \, v(\vec{x}-\vec{y}) \left\{ \langle \psi^\dagger(\vec{y}) \psi(\vec{x}) \rangle G(\vec{y}, \vec{x}'; \vec{z}) - \langle \psi(\vec{y}) \psi(\vec{x}) \rangle F^*(\vec{y}, \vec{x}'; -\vec{z}^*) \right\} = \delta(\vec{x}-\vec{x}'),$$

$$(12.35b) \quad \left\{ \vec{z} - \frac{1}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 - \mu + u(\vec{x}) + \int d\vec{y} \, v(\vec{x}-\vec{y}) \langle N(\vec{y}) \rangle \right\} F^*(\vec{x}, \vec{x}'; -\vec{z}^*) + \\ + \int d\vec{y} \, v(\vec{x}-\vec{y}) \left\{ \langle \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{y}) \rangle F^*(\vec{y}, \vec{x}'; -\vec{z}^*) - \langle \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{y}) \rangle G(\vec{y}, \vec{x}'; \vec{z}) \right\} = 0.$$

Vergleicht man dieses System z.B. mit [8], S. 491, Gleichung (55.22) und Gleichung (55.24), so sieht man, daß letztere aus (12.35a/b) hervorgehen, wenn man grob vereinfachend

$$\langle \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{y}) \rangle \approx \langle \psi(\vec{x}) \rangle^* \langle \psi(\vec{y}) \rangle \quad \text{und} \quad \langle \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{y}) \rangle \approx \langle \psi(\vec{x}) \rangle^* \langle \psi(\vec{y}) \rangle^*$$

setzt.

Wir wollen dieses Kapitel mit einer kurzen Bemerkung über einen Fall abschließen, bei dem man keine Zeitumkehr-Invarianz für den Hartree-Fock-Operator Ω voraussetzen kann. Als physikalisches Beispiel sei etwa an die Supraleitung in ferromagnetischem Material gedacht, bei dem man den zusätzlichen, spinabhängigen Energieterm u_σ in (A1.40a) nicht mehr vernachlässigen darf. Wenn wie bisher der Hartree-Fock-Austauschbeitrag in (12.3) vernachlässigt wird, erhält man mit $\underline{u}_\sigma = -u_\sigma$ aus Gleichung (12.2b) das modifizierte Anregungsspektrum:

$$(12.36) \quad E'_\sigma(\vec{k}) = u_\sigma \pm E_\sigma(\vec{k}).$$

In diesem Fall geht man am besten von der Konsistenz-Gleichung in der all-

gemeinen Form (11.20) aus:

$$(12.37) \quad (\eta \cdot 1 + \tilde{G}(\beta)) \cdot \mathcal{N} = 1 ,$$

$$\text{mit } \tilde{G}(\beta) = e^{\beta \Omega} = \mathcal{L}^{-1}\{G(z)\}_{\beta} , \quad (0 < \beta < \infty) ,$$

indem man $G_k(k; z)$ aus (12.2b) und das dazugehörige $F_k(k; z)$ aus (11.1b) entnimmt und die benötigten Laplace-Rücktransformaten berechnet, was keine Schwierigkeiten bereitet. (Auf diese Weise hätte man natürlich auch die Ergebnisse (12.12) und (12.22) gewinnen können.)

13. MAGNETISMUS: ISING- UND HEISENBERG-MODELL

Die in den ersten sechs Kapiteln entwickelte Darstellung von Korrelationsfunktionen durch Matricelemente entsprechender Korrelations-(Super-)Operatoren bringt auch bei der Behandlung von Spin-Korrelationsfunktionen große Vorteile mit sich. Wir wollen das anhand einiger einfacher Beispiele in diesem Kapitel demonstrieren. Insbesondere können wir auch ohne neue Rechnungen eine Dyson-Gleichung für den Spin-Propagator angeben, indem wir die allgemeine Identität (A4.24) benutzen. Überhaupt ändert sich an der formalen Struktur der Gleichungen in unserem Formalismus nichts gegenüber den Gleichungen der Kapitel 7 bis 10. Im Detail werden die Ergebnisse natürlich ganz anders aussehen, weil sich die Vertauschungsrelationen für Spinoperatoren von denen für die Feldoperatoren unterscheiden. Die komplizierteren zyklischen Vertauschungsrelationen waren wohl auch der Grund für die Einführung von (Pseudo-)Feldoperatoren anstelle von Spinoperatoren im Magnetismus¹⁾; damit wurden Wick'sches Theorem und Diagramm-Technik wieder anwendbar. (Allerdings wird dieser Vorteil mit dem Nachteil möglicher "unphysikalischer Zustände" erkaufte.) Wir werden sehen, daß der Umweg über die Feldoperatoren im Superoperatorformalismus nicht nötig ist.

1) z.B. die Holstein-Primakoff-Transformation auf Magnonoperatoren oder die Abrikosov'schen Pseudo-Fermionoperatoren.

Wir definieren ganz analog zu dem gewöhnlichen Propagator (7.2) den Spin-Propagator¹⁾²⁾:

$$(13.1) \quad G(z) \equiv (S^{(+)})^{\dagger} \hat{S} \frac{1}{z - \hat{H}} |S^{(+)}\rangle \cdot (S^{(+)} | \hat{S} | S^{(+)})^{-1} = \\ = \frac{1}{z - \Omega - M(z)} ,$$

wobei $|S^{(+)}\rangle$ den Satz von N Spinoperatoren $\{|S_i^{(+)}\rangle\}$ bezeichnet und³⁾

$$(13.2a) \quad \Omega = (S^{(+)} | \hat{S} \hat{H} | S^{(+)}) \cdot (S^{(+)} | \hat{S} | S^{(+)})^{-1} ,$$

$$(13.2b) \quad M(z) = (S^{(+)} | \hat{H} Q^{\dagger} \hat{S} \frac{1}{z - Q \hat{H} Q} Q \hat{H} | S^{(+)}) \cdot (S^{(+)} | \hat{S} | S^{(+)})^{-1} ,$$

$$(13.2c) \quad Q = \mathbb{1} - P \quad \text{mit} \quad P = |S^{(+)}\rangle \cdot (S^{(+)} | \hat{S} | S^{(+)})^{-1} \cdot (S^{(+)} | \hat{S}$$

bedeuten. Die Dyson-Gleichung in der modifizierten Form (13.1) kann man ohne neue Rechnung aus der Identität (A4.24) entnehmen. Wie schon früher wird es für den Fall eines translationsinvarianten Systems (bei Verschiebung des Koordinatensystems um einen Gittervektor $\vec{R}_G$) günstig sein, in einer fourier-reziproken Darstellung zu arbeiten, in der dann alle (Super-) Matrixelemente der Form (13.1,2) diagonal sind. Im Anhang A2 werden fouriertransformierte Spinoperatoren eingeführt.

Als konkretes Anwendungsbeispiel für (13.1) können wir an die Berechnung der dynamischen Suszeptibilität $\chi^{xy}(\omega)$ für einen Heisenberg-Magneten (konst. h-Feld in z-Richtung) denken, der einem explizit zeitabhängigen Feld $h_y(t)$ in y-Richtung ausgesetzt ist. Die lineare Antworttheorie ergibt dann für die in x-Richtung gemessene Magnetisierung:

$$(13.3) \quad \langle \delta M_x \rangle_{\omega} = \chi^{xy}(\omega) h_y(\omega)$$

1) Solange keine Verwechslung möglich ist, werden wir die gleichen Bezeichnungen wie früher wählen.

2) Diese Definition wäre für einen Paramagneten ohne äußeres Feld nicht möglich, weil der Nenner verschwindet; wir nehmen also immer ein Feld $h > 0$ in z-Richtung an.

3) Für ein (gitter-)translationsinvariantes System ist der Satz $\{|S_k^{(+)}\rangle\}$ vorteilhafter.

mit (vergl. (A3.14)):

$$(13.4) \quad \chi^{xy}(t) = -(g\mu_B)^2 \frac{\theta(t)}{i} \langle [S^x(t), S^y(0)]_- \rangle = \\ = -(g\mu_B)^2 \sum_{i,j} \langle S_i^x | \tilde{K}_1^{(-1,1)}(t) | S_j^y \rangle.$$

Führen wir hier die Spinoperatoren $S_i^{(*)} = S_i^x \pm i S_i^y$ ein und berücksichtigen die Invarianz des ungestörten Hamiltonoperators gegenüber Drehungen um die z-Achse ($[H, S^z] = 0$), so ergibt sich:

$$(13.5) \quad \chi^{xy}(t) = -\frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \Im \sum_{i,j} \langle S_i^{(+)} | \tilde{K}_1^{(-1,1)}(t) | S_j^{(+)} \rangle = -\frac{(g\mu_B)^2}{2} \Im \langle S_0^{(+)} | \tilde{K}_1^{(-1,1)}(t) | S_0^{(+)} \rangle N^2.$$

Formel (3.2) für die Fouriertransformierte des Green's Operators liefert dann zusammen mit der Definition des Spin-Propagators:

$$(13.6) \quad \chi^{xy}(\omega) = -\frac{1}{2} (g\mu_B)^2 \Im \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{i,j} \langle S_i^{(+)} | \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\epsilon - A} | S_j^{(+)} \rangle \cdot \frac{1}{(-2\langle S_j^{(+)} \rangle)} (-2\langle S_j^{(+)} \rangle) = \\ = (g\mu_B)^2 \Im \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{i,j} \langle S_j^{(+)} \rangle G_{ij}(z = \omega + i\epsilon).$$

Für ein translationsinvariantes System ($\langle S_j^{(+)} \rangle \equiv R$ unabhängig vom Ort $\vec{R}_j$) bekommt man daraus analog zum Vorgehen am Ende des Kapitels 8 (siehe Gleichungen (8.17) ff.):

$$(13.7) \quad \chi^{xy}(\omega) = (g\mu_B)^2 NR \Im \langle S_0^{(+)} | \hat{S} \frac{1}{\omega + i\epsilon - \hat{H}} | S_0^{(+)} \rangle \frac{N}{2R} = \\ = -\frac{1}{2} (g\mu_B)^2 NR \frac{\gamma(\vec{0}; \omega)}{[\omega - \Omega(\vec{0}) - \Delta(\vec{0}; \omega)]^2 + [\frac{1}{2} \gamma(\vec{0}; \omega)]^2}$$

mit

$$(13.8a) \quad \gamma(\vec{k}; \omega) = 2\pi \langle S_{\vec{k}}^{(+)} | \hat{H} Q \hat{S} \delta(\omega - Q \hat{H} Q) Q \hat{H} | S_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \cdot \frac{N}{2R},$$

$$(13.8b) \quad \Delta(\vec{k}; \omega) = \frac{PP}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\omega} \frac{\gamma(\vec{k}; \bar{\omega})}{\omega - \bar{\omega}},$$

$$(13.8c) \quad \Omega(\vec{k}) = \langle S_{\vec{k}}^{(+)} | \hat{S} \hat{H} | S_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \cdot \frac{N}{2R},$$

und den Abkürzungen

$$(13.8d) \quad R = \langle S_i^{(+)} \rangle; \quad Q = 1 - \frac{N}{2R} \sum_{\vec{k}} |S_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \langle S_{\vec{k}}^{(+)}| \hat{S}.$$

Gleichung (13.7) ist ein sehr allgemeines Resultat, weil vom Hamiltonoperator H nur Invarianz gegenüber Gittertranslationen und $[S^z, H] = 0$ vorausgesetzt wurden. Wenn man annehmen darf, daß $\tilde{\chi}(\vec{\delta}; \omega)$ sehr klein ist, dann wird:

$$(13.9) \quad \chi^{xy}(\omega) \cong - (g\mu_B)^2 NR \pi \delta(\omega - \Omega(\vec{k}=\vec{\delta})).$$

(I) Berechnung des Spektrums $\Omega(\vec{k})$ für das Heisenberg-Modell

Der Hamiltonoperator lautet:

$$(13.10) \quad H_{\text{Heis}} = -g\mu_B h \sum_{j=1}^N S_j^{(y)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j.$$

Mit Hilfe der Formeln (A2.15) bekommt man:

$$(13.11a) \quad -\Omega(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}) + \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}_1; \vec{k}) [2F_0(\vec{k}_1) - F_1(\vec{k} - \vec{k}_1)]$$

mit

$$(13.11b) \quad \tilde{v}(\vec{k}_1; \vec{k}) = \tilde{v}(\vec{k}_1) - \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1); \quad \tilde{v}(\vec{k}) = \sum_i v_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)},$$

$$(13.11c) \quad \varepsilon(\vec{k}) = g\mu_B h + \tilde{v}(\vec{\delta}; \vec{k}) R; \quad R = \langle S_j^{(y)} \rangle,$$

$$(13.11d) \quad F_0(\vec{k}_1) = \langle [\delta S_{\vec{k}_1}^{(y)}, (\delta S_{\vec{k}_1}^{(y)})^\dagger]_+ \rangle \frac{N}{2R}; \quad \delta A = A - \langle A \rangle,$$

$$(13.11e) \quad F_1(\vec{k}) = \langle [S_{\vec{k}}^{(y)}, (S_{\vec{k}}^{(y)})^\dagger]_+ \rangle \frac{N}{2R}.$$

Werden die Fluktuationen F_0, F_1 in (13.11a) zunächst vernachlässigt, so erhält man für das Spektrum eine Form, die gewöhnlich im Rahmen der "Random-Phase"-Approximation (RPA) gewonnen wird:

$$(13.12) \quad \Omega^{\text{RPA}}(\vec{k}) = -\varepsilon(\vec{k}) = -g\mu_B h - \tilde{v}(\vec{\delta}; \vec{k}) R.$$

Im Gegensatz zur $\vec{k}$ -unabhängigen Molekularfeld-Näherung:

$$(13.13) \quad \Omega^{\text{MFA}}(\vec{k}) = -g\mu_B h - \tilde{v}(\vec{\delta}) R = \text{const. (von } \vec{k} \text{ unabh.)}$$

gibt die RPA eine Beschreibung der in einem Heisenberg-Magneten auftretenden "Spinwellen-Anregungen" (Magnonen) mit Wellenzahlvektor $\vec{k}$:

$$(13.14) \quad \tilde{v}(\vec{0}; \vec{k}) R = \lim_{k \rightarrow 0} k^2 \cdot \frac{R}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) v_{ij} .$$

Mit Hilfe der Formeln (A2.17) überzeugt man sich leicht davon, daß die Vernachlässigung der Fluktuationen im Ising-Modell, d.h. die zu (13.12) äquivalente Approximation für einen Ising-Magneten, auf das MFA-Resultat (13.13) führt; das entspricht der Tatsache, daß im Ising-Modell das Umklappen eines Spins ($R \rightarrow -R$ für $S = \frac{1}{2}$) die energetisch kleinste Anregung ist, während im Heisenberg-Magneten transversale Anregungen beliebig kleiner Energie existieren (Spinwellen großer Wellenlänge, vergl. (13.14)). Es bleibt nun noch die Aufgabe, zunächst R (die Magnetisierung pro Spin ist $R/(g\mu_B)$) und später die Fluktuationen F_0, F_1 konsistent, d.h. im Rahmen der jeweils benutzten Approximation, zu berechnen.¹⁾

Dazu eignet sich die Superoperator-Schreibweise wieder besonders gut! Analog zur HFA (Kap. 10) und zur verallgemeinerten HFA (Kap. 11) entspricht der Vernachlässigung von $\mathcal{J}(\vec{0}; \omega)$ in (13.7) die Approximation:

$$(13.15) \quad (S^{(+)}) \hat{H} \cong (S^{(+)} | \hat{H} \mathcal{P}^+ \equiv \Omega \cdot (S^{(+)} | .$$

Wir berechnen zunächst R und $F_1(\vec{k})$; dazu benutzen wir die Identität (4.1) (verallgemeinertes Dissipations-Fluktuations-Theorem) und bekommen in obiger Näherung²⁾:

$$(13.16) \quad (S^{(+)} | \hat{g} | S^{(+)}) \cdot (S^{(+)} | \hat{g} | S^{(+)})^{-1} \cong - \coth \left(\frac{\beta}{2} \Omega \right) .$$

In der Wellenzahlvektor-Darstellung ist das Matricelement der linken Seite gerade $F_1(\vec{k})$, und wir haben also:

$$(13.17) \quad \boxed{F_1(\vec{k}) \cong - \coth \left(\frac{\beta}{2} \Omega(\vec{k}) \right) .}$$

1) Das wurde in den Arbeiten [17-19] nicht getan, sondern es wurden neue, inkonsistente Näherungen für R, F_0, F_1 eingesetzt.

2) Wir nehmen hier $\hbar > 0$ und damit $R \neq 0$ an; anderenfalls müßte $(S^{(+)} | \hat{g} | S^{(+)})$ auf der rechten Seite von (13.16) als Faktor stehen (vergl. Fußnote 2), S. 47)

Um aus (13.16) einen Ausdruck für R zu gewinnen, benutzen wir die Identität

$$(13.18a) \quad \frac{1}{2} [S_i^{(v)}, S_i^{(w)}]_+ = S(S+1) - (S_i^{(w)})^2 \quad \left(= \frac{1}{2} \text{ für } S = \frac{1}{2} \right),$$

woraus für ein homogenes ($\langle (S_i^{(w)})^2 \rangle$ unabhängig von $\vec{R}_i$) System exakt folgt:

$$(13.18b) \quad \frac{1}{2} \langle [S_i^{(v)}, S_i^{(w)}]_+ \rangle = S(S+1) - R^2 - \frac{R}{N} \sum_{\vec{k}} F_0(\vec{k})$$

$$= \frac{1}{2} \text{ für } S = \frac{1}{2}.$$

Betrachtet man nun das $(\vec{R}_i - \vec{R}_i)$ -Element von (13.16)¹⁾, so ergibt sich für beliebigen Spin S

$$(13.19a) \quad \boxed{\frac{S(S+1)}{R} - R \cong \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [F_0(\vec{k}) + F_1(\vec{k})]}$$

und speziell für $S = \frac{1}{2}$:

$$(13.19b) \quad \frac{1}{R_{1/2}} \cong - \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \coth\left(\frac{\beta}{2} \Omega_{1/2}(\vec{k})\right).$$

Dies ist der bekannte Ausdruck für die Spin $S = \frac{1}{2}$ Magnetisierung, wie er sich auch in der RPA ergibt [20]. Gleichung (13.19a) dagegen, die für $S = \frac{1}{2}$

$$(13.19c) \quad \frac{1}{4R_{1/2}} - R_{1/2} \cong \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} F_0^{(1/2)}(\vec{k})$$

lautet, stellt einen interessanten Zusammenhang zwischen R und den Fluktuationsfunktionen $F_0(\vec{k})$ und $F_1(\vec{k})$ her. Man erkennt in (13.19a) bzw. (13.19c) folgenden physikalischen Sachverhalt: nähert man sich dem Curie-Punkt von $T < T_C$ her (das bedeutet bei abgeschaltetem äußeren Feld h , daß $R \rightarrow 0$ strebt), dann werden die Fluktuationen in der z-Komponente der Magnetisierung, beschrieben durch $F_0(\vec{k})$, unendlich. Diese Tatsache ist aus allgemeinen thermodynamischen Überlegungen wohl bekannt.

¹⁾ Wegen der unsymmetrischen Definition (A2.2) ist ein Darstellungswechsel (Ortsvektor $\vec{R}_i \rightarrow$ Wellenzahlvektor $\vec{k}$) hier etwas unübersichtlicher als bei den Feldoperatoren; die Tjablikow-Definition [20], S. 275 wäre hier besser geeignet - sie hat allerdings nicht die einfachen Vertauschungsrelationen (A2.4b).

Zu der noch ausstehenden Berechnung von $F_0(\vec{k})$ benutzen wir die Korrelationsfunktion:¹⁾

$$(13.20) \quad f(\vec{k}; t) = \langle [\delta S_{\vec{k}}^{(0)}, (\delta S_{\vec{k}}^{(0)}(t))^{\dagger}]_- \rangle = (\delta S_{\vec{k}}^{(0)})^{\dagger} \hat{G} e^{-it\hat{H}} \delta S_{\vec{k}}^{(0)}.$$

Nach Formel (4.3) ist dann:

$$(13.21) \quad F_0(\vec{k}) = -\frac{N}{2R} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \coth\left(\frac{\beta}{2}\omega\right) f(\vec{k}; \omega).$$

Nun läßt sich die Bewegungsgleichung für $f(\vec{k}; t)$ leicht mit Hilfe von (A2.15a) aufschreiben, und an den darin auftretenden Heisenberg-Operatoren $S_{\vec{k}}^{(0)}(t)$ kann die Approximation (13.15) angebracht werden, die für ein translationsinvariantes System eben einfach

$$(13.22) \quad S_{\vec{k}}^{(+)}(t) \cong S_{\vec{k}}^{(+)} e^{it\Omega(\vec{k})}$$

lautet. Nach einigen Nebenrechnungen bekommt man schließlich:

$$(13.23) \quad F_0(\vec{k}) \cong \frac{1}{4N} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{\tau}(\vec{k}_1; \vec{k}) \frac{1 - \coth\left(\frac{\beta}{2}\Omega(\vec{k}-\vec{k}_1)\right) \coth\left(\frac{\beta}{2}\Omega(\vec{k}_1)\right)}{\Omega(\vec{k}-\vec{k}_1) - \Omega(\vec{k}_1)}.$$

Die Gleichungen (13.11a) für $\Omega(\vec{k})$, (13.17) für $F_1(\vec{k})$, (13.19a) für R und (13.23) für $F_0(\vec{k})$ bilden ein konsistentes System zur Bestimmung des Spektrums, der Magnetisierung und der Fluktuationen.

Im Grenzfall $\beta|\Omega(\vec{k})| \gg 1$, d.h. für $T \rightarrow 0$, bekommt man

$$(13.24a) \quad F_0(\vec{k}) \underset{(T \rightarrow 0)}{=} 0; \quad (13.24b) \quad F_1(\vec{k}) \underset{(T \rightarrow 0)}{=} 1,$$

und damit aus (13.19a) bzw. (13.11a)

$$(13.25a) \quad R \underset{(T \rightarrow 0)}{=} S \quad (13.25b) \quad \Omega(\vec{k}) \underset{(T \rightarrow 0)}{=} -g\mu_B h - \tilde{\tau}(\vec{0}; \vec{k}) S,$$

das aus der Spinwellen-Theorie bei Temperatur $T=0$ bekannte Ergebnis. Die Fluktuationen sind dann "eingefroren".

¹⁾ Im Ising-Modell ist $f(\vec{k}; t) = 0$, also ungeeignet zur Bestimmung von Fluktuationen in der z-Komponente der Magnetisierung.

Nach dieser Anwendung des Superoperator-Formalismus am Heisenberg-Ferromagneten¹⁾, wenden wir uns zum Schluß noch der Herleitung einiger exakter Ergebnisse für das

(II) Ising-Modell für beliebigen Spin S :

zu. Der Hamiltonoperator lautet

$$(13.26) \quad H_{\text{Ising}} = -g\mu_B h \sum_{j=1}^N S_j^{(y)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} S_i^{(z)} S_j^{(z)}$$

und unterscheidet sich nur in der Ersetzung des Skalarprodukts durch das Produkt der z-Komponenten der Spinoperatoren vom isotropen Heisenberg-Modell; das bringt allerdings ganz beträchtliche Vereinfachung gegenüber letzterem. Insbesondere ist die z-Komponente der einzelnen Spins, $S_i^{(z)}$, Konstante der Bewegung und, wie im Anhang A2 gezeigt wurde, gilt

$$(13.27a) \quad \hat{H}_{\text{Ising}} |S_j^{(\pm)}\rangle = \mp g\mu_B \frac{1}{2} H_j^{(y)} |S_j^{(\pm)}\rangle = |(\mp g\mu_B H_j^{(y)}) S_j^{(\pm)}\rangle$$

mit dem "Operator für das Magnetfeld am Ort $\vec{R}_j$ ":

$$(13.27b) \quad H_j^{(y)} = h \cdot 1 + \frac{1}{g\mu_B} \sum_{i=1}^N v_{ij} S_i^{(y)}.$$

Es ist nun wichtig zu bemerken, daß auch $H_j^{(y)}$ Konstante der Bewegung ist,

$$(13.28a) \quad [H, H_j^{(y)}]_- = 0,$$

und außerdem auch der Magnetfeldoperator mit dem Spinvektoroperator am Ort $\vec{R}_j$ vertauscht:

$$(13.28b) \quad [H_j^{(y)}, \vec{S}_j]_- = 0.$$

Die letzte Beziehung führt zu dem zweiten Gleichheitszeichen in (13.27a); sie ist eine Folge von $v_{ii}=0$. (H_{Ising} operiere in dem $(2S+1)^N$ -dimensionalen Hilbert-Raum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$; $H_j^{(y)}$ operiert dann in $\bar{\mathcal{H}}_j = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{j-1} \otimes \mathcal{H}_{j+1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$,

1) Eine detaillierte Diskussion des komplizierten selbstkonsistenten Gleichungssystems zur Bestimmung von $\Omega(\vec{k})$ und R steht noch aus.

während $\hat{S}_j$ Operator in $\mathfrak{h}_j$ ist.) Durch die Vertauschungseigenschaften des Magnetfeld-Operators wird (13.27a) zu einer "Quasi-Eigenwertgleichung", und man überzeugt sich leicht von der Gültigkeit der Gleichung:

$$(13.29) \quad \hat{f}(\hat{H}_{\text{ising}}) |S_j^{(\pm)}\rangle = | \hat{f}(\mp g \mu_B H_j^{(0)}) S_j^{(\pm)} \rangle$$

für jede in eine Potenzreihe entwickelbare Funktion $\hat{f}(x)$. Mit (13.29) folgt aber weiter für eine beliebige Korrelationsfunktion:

$$(13.30) \quad \langle S_i^{(\omega)} | \hat{S} \hat{f}(\hat{H}_{\text{ising}}) | S_j^{(\omega')} \rangle = 2\alpha \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{ij} \langle \hat{f}(-\alpha g \mu_B H_j^{(0)}) S_j^{(\omega')} \rangle;$$

denn die linke Seite ist:

$$\begin{aligned} \langle [\hat{f}(-\alpha' g \mu_B H_j^{(0)}) S_j^{(\omega')}, S_i^{(\omega)}] \rangle &= \langle \hat{f}(-\alpha' g \mu_B H_j^{(0)}) (\alpha' + \alpha) (-\alpha' - \alpha) \delta_{ij} S_j^{(\omega' - \alpha)} \rangle + \\ &+ \text{Tr} \{ [\hat{f}(-\alpha' g \mu_B H_j^{(0)}) S_i^{(\omega')}] S_j^{(\alpha')} \}. \end{aligned}$$

Der letzte Term verschwindet nach zyklischer Vertauschung und Überwälzen des Kommutators wegen $[S_j^{(\omega)} g, \hat{f}(-\alpha' g \mu_B H_j^{(0)})] = 0$; im ersten Term folgt $\alpha = \alpha'$ aus der Erhaltung der z-Komponente des Gesamtspins, womit (13.30) bewiesen ist.

Gleichung (13.30) enthält ein von J.W. Essam und H. Garelick [21] erzieltes Ergebnis als Spezialfall, wenn man $\hat{f}(\hat{H}_{\text{ising}}) = 2\pi \delta(\omega - \hat{H}_{\text{ising}})$ wählt (vergl. Gleichungen (4.4), (4.9) in [21]). Aus der Herleitung unseres Ergebnisses ist sofort ersichtlich, daß (13.30) auch für den Fall eines inhomogenen Systems (das Feld h in z-Richtung kann ortsabhängig sein $h \rightarrow h_j$) gültig bleibt. In [21] wurde nur der homogene Fall betrachtet. Aus Gleichung (13.30) folgt die interessante Tatsache, daß im Ising-Modell Korrelationen $\langle S_i^{(\omega)}(t) S_j^{(\omega')}(t) \rangle$ für $\vec{R}_i \neq \vec{R}_j$ nicht existieren.

Wir berechnen auch hier die Suszeptibilität (13.5) und bekommen mit Hilfe von (13.30) direkt:

$$(13.31) \quad \chi^{xy}(t) = -(g\mu_B)^2 \theta(t) \sum_{j=1}^N \langle S_j^{(0)} \cos(g\mu_B H_j^{(0)} t) \rangle,$$

die auch für inhomogenes Magnetfeld gültige Erweiterung der Formel (5.6) in [21].

Formel (13.30) läßt sich noch weiter auswerten, weil $S_j^{(o)}$ und $H_j^{(o)}$ in verschiedenen Räumen wirken; führt man nach einer Idee von Essam und Garelick [21] den Projektor

$$(13.32) \quad P_r^{(l)} = \sum_{s \neq r} \frac{g\mu_B H_L^{(o)} - \omega_s^{(l)}}{\omega_r^{(l)} - \omega_s^{(l)}} = \sum_{\alpha} |l r \alpha\rangle \langle l r \alpha| ,$$

$$\text{mit } g\mu_B H_L^{(o)} |l r \alpha\rangle = \omega_r^{(l)} |l r \alpha\rangle ,$$

auf die (entarteten) Eigenzustände $|l r \alpha\rangle$ zum Eigenwert $\omega_r^{(l)}$ von $H_L^{(o)}$ ein, und beachtet ferner die Zerlegung:

$$(13.33) \quad H_{J\text{sing}} = -g\mu_B H_L^{(o)} S_L^{(o)} + H_L' ,$$

$$\text{mit } H_L' = -g\mu_B \sum_{j \neq l} h_j S_j^{(o)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq l} v_{ij} S_i^{(o)} S_j^{(o)} ,$$

($S_L^{(o)}$ ist Operator in $\mathcal{H}_L$; $H_L^{(o)}$ und H_L' operieren in $\overline{\mathcal{H}_L}$),

dann schreibt sich (13.30) für $i=j=l$; $\alpha=\alpha'=1$:

$$(13.34) \quad (S_L^{(+)} | \hat{S} (\hat{H}_{J\text{sing}}) | S_L^{(+)}) = 2 \sum_r f(-\omega_r^{(l)}) \langle P_r^{(l)} S_L^{(o)} \rangle = \\ = 2 \sum_r f(-\omega_r^{(l)}) \langle P_r^{(l)} \rangle S B_S(\beta \omega_r^{(l)} S) .$$

Darin ist $B_S(y)$ die Brillouin-Funktion. Damit ist die Berechnung von beliebigen Korrelationsfunktionen auf das Eigenwert-Problem (13.32) zurückgeführt; nimmt man nur Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn an, dann gibt es maximal $(2S+1)^z$ Frequenzen $\omega_r^{(l)}$, wenn z die Zahl der nächsten Nachbarn vom Spin am Ort $\vec{R}_L$ ist [21].

In (13.34) läßt sich die Bedeutung des "Operators für das Magnetfeld am Ort $\vec{R}_L$ ", $H_L^{(o)}$, klar erkennen: der Spin $\vec{S}_L$ am Ort $\vec{R}_L$ "sieht" nicht ein klassisches, konstantes Magnetfeld H_0 , um das er mit entsprechender Larmorfrequenz ω_0 präzessiert, sondern es gibt so viele verschiedene Larmorfrequenzen ω_r , wie der Magnetfeldoperator verschiedene Eigenwerte besitzt. Es überrascht deshalb nicht, daß an die Stelle der Magnetisierung im Falle eines klassischen Feldes H_0 :

$$(13.35a) \quad \langle S_L^{(0)} \rangle_{\text{klass. } H_0} = S B_S (\beta g \mu_B H_0 S)$$

jetzt die Form¹⁾:

$$(13.35b) \quad \langle S_L^{(0)} \rangle = \sum_r \langle P_r^{(1)} \rangle S B_S (\beta \omega_r^{(1)} S) = S \langle B_S (\beta g \mu_B H_L^{(0)} S) \rangle$$

tritt, in der über die möglichen Felder am Ort $\vec{R}_L$, $\omega_r^{(1)}/(g\mu_B)$ gemittelt wird; gewichtet wird mit der Wahrscheinlichkeit $\langle P_r^{(1)} \rangle$, daß sich die Umgebung von $\vec{S}_L$ in einem Zustand befindet, der am Ort $\vec{R}_L$ ein Feld der Größe $\omega_r^{(1)}/(g\mu_B)$ erzeugt.

Die Identität (13.35b) ist eine Verallgemeinerung auf beliebigen Spin einer in [22] erwähnten Gleichung für $S = 1/2$. Wegen $S B_S(\gamma) \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \gamma$ zeigt das exakte Ergebnis (13.35b), daß im Ising-Modell die Molekularfeld-Approximation für hohe Temperaturen ($\beta \rightarrow 0$) exakt wird (vergl. z.B. [23]):

$$(13.35c) \quad \langle S_L^{(0)} \rangle \stackrel{\text{MFA}}{=} S B_S (\beta g \mu_B \langle H_L^{(0)} \rangle S).$$

14. ZUSAMMENFASSUNG

Im ersten Teil der Arbeit werden alle gebräuchlichen Typen von Korrelationsfunktionen und thermodynamischen Green's Funktionen als Matricelemente gewisser Superoperatoren ausgedrückt. Es zeigt sich, daß der Korrelationsoperator $\hat{K}^{(m,n)}$ die zentrale mathematische Größe zur Charakterisierung physikalischer Systeme ist. Durch ihn werden sowohl die Evolution in der Zeit (Dynamik) als auch die statistischen Eigenschaften eines Systems beschrieben. Der "Green's Operator", $\hat{K}_S^{(m,n)}(t)$, unterscheidet sich von dem Korrelationsoperator nur durch eine zusätzliche, physikalisch irrelevante Sprungfunktion. Die Dispersionsrelationen für die Fouriertransformierte des "Green's Operators" bestätigen (Gleichung (3.8)), daß die Kenntnis der Matricelemente des Spektraloperators $\hat{K}^{(m,n)}(\omega)$ (Fouriertransformierte

1) $\sum_r P_r^{(1)}$ ist Eins-Operator in $\vec{h}_L$, also ist $\langle S_L^{(0)} \rangle = \sum_L \langle P_r^{(1)} S_L^{(0)} \rangle$.

des Korrelationsoperators) zur vollständigen Beschreibung eines Systems ausreicht.

Die Formeln (4.1) bis (4.3) geben eine exakte Verknüpfung zwischen beliebigen (gewöhnlichen, Kommutator- und Antikommutator-) Korrelationsfunktionen. Sie bilden deshalb (im mathematischen Sinne) eine Verallgemeinerung des Dissipations-Fluktuations-Theorems. Darüber hinaus stellt die Identität (4.1) ein sehr nützliches Instrument zur selbstkonsistenten Berechnung von Hartree-Fock-Energie (10.7) und Paaramplituden (11.20) in Vielteilchen-(Bosonen oder Fermionen)-Systemen sowie von Magnetisierung und Fluktuationen (13.16), (13.21), (13.23) in einem N-Spin-System dar.

Nachdem in (6.2) der Spektraloperator durch den (Super-)Propagator $\mathcal{G}(\mathbf{z})$ ausgedrückt ist, wenden wir uns von Kapitel 7 bis 12 speziell N-Boson (bzw. -Fermion)-Systemen zu. In Kap. 8 wird unter Benutzung eines geeignet gewählten, idempotenten Operators $\mathcal{P}$ eine Dyson-Gleichung für den gewöhnlichen Propagator $G(\mathbf{z})$ ($G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{z}, \mathbf{z}'; \mathbf{z}) = \langle \mathbf{z}\alpha | G(\mathbf{z}) | \mathbf{z}\alpha' \rangle = -(\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{z}) | \mathcal{G}(\mathbf{z}) | \psi_{\alpha'}(\mathbf{z}'))$) aufgestellt. Die Selbstenergie erscheint darin als Superoperator-Matrixelement! Wir weisen noch einmal darauf hin, daß die Feynmansche Diagrammtechnik zur Analyse der Störungsentwicklung von $G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{z}, \mathbf{z}'; \mathbf{z})$ in dieser Arbeit nicht benutzt wird. Es hat sich gezeigt (Kap. 5 bis 8), daß die hier eingeführte Superoperatormethode die Diagrammtechnik überflüssig macht.

Nach Herleitung einer Kettenbruch-Entwicklung für $G(\mathbf{z})$ in Kap. 9 und einer Diskussion der Hartree-Fock-Näherung in Kap. 10 stellen wir in Kap. 11 die sogenannte "Paarapproximation" in Vielteilchensystemen vor. Dabei wird der Vorteil der kompakten Superoperator-Schreibweise ($\mathcal{G}(\mathbf{z})$) für die Menge aller Matrixelemente des (Super-)Propagators $\mathcal{G}(\mathbf{z})$ bezüglich der Feldoperatoren $\psi_{\alpha}(\mathbf{z}), \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{z})$ besonders deutlich. Schon in der verallgemeinerten HFA (11.24a) hat man ein Gleichungssystem gewonnen, das zur Beschreibung von Supraleitung in Elektronensystemen (Gorkov-Gleichungen) ebenso wie zur mikroskopischen Behandlung des Phänomens Superfluidität in Bosonen(He^4)- und Fermionen(He^3)-Systemen geeignet ist. Das Gleichungssystem (11.24b) stellt zusammen mit den Selbstkonsistenzgleichungen (11.22) das Resultat der Paarapproximation dar. Die Formulierung dieser Näherung für so allgemeine Vielteilchensysteme ist bisher nicht bekannt gewesen. (Auch hier sei bemerkt, daß weder die Diagramm-

technik noch die Methode der kanonischen Transformation (Bogoliubov-Transformation) benutzt wurden.)

In Kap. 12 werden die Paarapproximation und besonders die Selbstkonsistenz-Gleichungen für ein translationsinvariantes System diskutiert. Dabei bestätigen sich die Auffassungen von Evans und Imry über Superfluidität in Bosonensystemen [16]. Eine Untersuchung des langwelligen Anregungsspektrums ($E(k \rightarrow 0)$) zeigt ferner, daß unsere Ergebnisse - soweit es die Voraussagen über das Vorzeichen der Zweiteilchen-Wechselwirkung betrifft - im Widerspruch zur Bogoliubov-Theorie stehen (12.29 ff.). Die auch für inhomogene Systeme gültigen Gleichungen (12.35) für den gewöhnlichen und den anomalen Propagator, $G(x)$ bzw. $F(x)$, zeigen, daß unsere Theorie die Bogoliubov-Theorie insoweit verbessert, daß auch Korrelationen $\langle \delta\phi(x) \delta\phi(y) \rangle$ bzw. $\langle \delta\phi(x) \delta\phi^\dagger(y) \rangle$ berücksichtigt werden. Wichtiger ist jedoch die Feststellung, daß die Superfluidität sich hier sehr deutlich als Ausdruck des übergeordneten Phänomens "Paarbildung" in Vielteilchensystemen darstellt, was zunächst ganz unabhängig von dem Phänomen Bose-Einstein-Kondensation ist.

Im letzten Kapitel wurde dann eine Anwendung des Formalismus auf ein System von N-Spins gegeben. Das Spektrum $\Omega(k)$ für ein isotropes Heisenberg-Modell wurde in einer Näherung berechnet, die über die RPA hinausgehend Fluktuationen mitberücksichtigt. Entscheidend ist auch hierbei die selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung und der Fluktuationen, die auf den interessanten Zusammenhang (13.19) führt.

Zum Schluß wurden noch einige exakte Resultate für das Ising-Modell mit beliebigem Spin S hergeleitet. Sie enthalten die von Essam und Garelick [21] für ein solches System angegebenen Ergebnisse als Spezialfall.

A N H A N G

A1. SUPEROPERATOREN UND ZWEITE QUANTISIERUNG

Auf eine Darstellung des Superoperator-Formalismus an dieser Stelle wird verzichtet, weil zum Verständnis der vorliegenden Arbeit die in Kap. 2 angeführten Regeln ausreichen. Ein ausführlicher Anhang über die Superoperator-Methode findet sich in [4][25].

(I) Definition der Feldoperatoren:

Wir werden hier - abweichend von der üblichen Schreibweise - Vernichtungs- (und Erzeugungs-)Operatoren stets mit dem Kernbuchstaben $\mathcal{A}$ (und $\mathcal{A}^\dagger$) bezeichnen. Wenn $\{|m\rangle\}$ irgendeine vollständige Orthonormalbasis im Einteilchen-Hilbertraum ist, dann soll $\mathcal{A}_m$ der "Vernichtungsoperator für ein Teilchen im Zustand $|m\rangle$ " sein; d.h. seine Wirkung auf einen Ket des Besetzungszahlraums ist:

$$(A1.1) \quad \mathcal{A}_m |n_1, n_2, \dots, n_m, \dots\rangle = (-\eta)^{n_1 + n_2 + \dots + n_{m-1}} \sqrt{n_m} |n_1, n_2, \dots, n_m - 1, \dots\rangle$$

($\eta = -1$ für Bosonen; $\eta = +1$ für Fermionen)

Unter den Feldoperatoren im engeren Sinne versteht man folgende Linearkombination:¹⁾

$$(A1.2a) \quad \mathcal{A}_\alpha(\vec{x}) = \sum_m \varphi_m(\vec{x}, \alpha) \mathcal{A}_m = \sum_m \langle \vec{x}, \alpha | m \rangle \mathcal{A}_m \equiv \langle \vec{x}, \alpha | \cdot \mathcal{A} ,$$

$$(A1.2b) \quad \mathcal{A}_\alpha^\dagger(\vec{x}) = (\mathcal{A}_\alpha(\vec{x}))^\dagger = \sum_m \mathcal{A}_m^\dagger \langle m | \vec{x}, \alpha \rangle \equiv \mathcal{A}^\dagger \cdot \langle \cdot | \vec{x}, \alpha \rangle ,$$

die man als "Vernichtungs- (bzw. Erzeugungs-)Operatoren für ein Teilchen im Zustand $|\vec{x}, \alpha\rangle$ " ansehen kann²⁾. Das symbolische Punkt-Produkt " $\cdot$ ".

1) Für eine (Wellen-)funktion $\varphi_n(\vec{x}, \alpha) \equiv \langle \vec{x}, \alpha | n \rangle$ wurde die Dirac-Schreibweise gewählt.

2) Für die Feldoperatoren haben wir die übliche Schreibweise $\mathcal{A}_\alpha(\vec{x})$ beibehalten, obwohl sie jetzt konsequenterweise mit $\mathcal{A}_{|\vec{x}, \alpha}$ bezeichnet werden sollten.

ermöglicht eine übersichtliche und kurze Schreibweise sehr vieler Formeln der Zweiten Quantisierung. Seine Bedeutung ist aus den Gleichungen (A1.2) abzulesen: « Ein- und derselbe Index (Quantenzahl, Variable) wird an die Leerstellen der Symbole zur Linken und zur Rechten des Punkts eingesetzt; dann ist über diesen Index zu summieren bzw. zu integrieren. »

Wegen der Orthonormalität der Basis $\{|m\rangle\}$ lassen sich die Gleichungen (A1.2) auch nach den ψ_m bzw. ψ_m^+ auflösen:

$$(A1.3a) \quad \psi_m = \sum_{\alpha} \int d^3x \langle m | \vec{x} \alpha \rangle \psi_{\alpha}(\vec{x}) = \langle m | \cdot \rangle \cdot \psi ,$$

$$(A1.3b) \quad \psi_m^+ = \sum_{\alpha} \int d^3x \psi_{\alpha}^+(\vec{x}) \langle \vec{x} \alpha | m \rangle = \psi^+ \cdot \langle \cdot | m \rangle .$$

(II) Vertauschungsrelationen

Wenn man Ausdrücke mit sehr vielen Feldoperatoren zu bearbeiten hat, ist es sehr zeitsparend, einen Zahlinde anstelle eines Satzes von Quantenzahlen zu setzen; z.B. $1 \equiv (\vec{x}, \alpha)$ etc. Damit lauten die Vertauschungsrelationen:

$$(A1.4) \quad \boxed{[\psi_1, \psi_2^+]_{\eta} = \delta_{12} \quad ; \quad [\psi_1, \psi_2]_{\eta} = 0 = [\psi_1^+, \psi_2^+]_{\eta} ,}$$

wobei $\eta = -1 (+1)$ für Bosonen (Fermionen) zu setzen ist. Für die Feldoperatoren (A1.2) würde (A1.4) ausgeschrieben so aussehen:

$$[\psi_{\alpha}(\vec{x}), \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}')]_{\eta} = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') ;$$

$$[\psi_{\alpha}(\vec{x}), \psi_{\alpha'}(\vec{x}')]_{\eta} = 0 = [\psi_{\alpha}^+(\vec{x}), \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}')]_{\eta} .$$

(III) Einteilchen-Operatoren

Im Formalismus der Zweiten Quantisierung wird ein allgemeiner Einteilchen-Operator $F^{(1)}$ bekanntlich in folgender Form (s. z.B. [8])

$$\begin{aligned}
 (A1.5) \quad F^{(e)} &= \sum_{\alpha, \alpha'} \int d\vec{x} \, \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{x}) f_{\alpha\alpha'}^{(e)}(\vec{x}) \psi_{\alpha'}(\vec{x}) = \\
 &= \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{k}'\sigma'} \psi_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \langle \vec{k}\sigma | f^{(e)} | \vec{k}'\sigma' \rangle \psi_{\vec{k}'\sigma'},
 \end{aligned}$$

durch Feldoperatoren ausgedrückt; darin ist $f^{(e)}$ der $F^{(e)}$ entsprechende (Dirac-) Operator im Einteilchen-Hilbertraum und $f^{(e)}$ der dazugehörige Differentialoperator. Entsprechend der Vereinbarung in Gleichung (A1.4) benutzen wir für $F^{(e)}$ auch die Kurzschrift:

$$(A1.6) \quad F^{(e)} = \psi_1^{\dagger} f_{12}^{(e)} \psi_2, \quad (\text{Summationsabkommen!})$$

wobei über doppelt auftretende Indizes zu summieren (bzw. integrieren) ist. (Wenn man in der Ortsdarstellung arbeitet, ist bei dieser Kurzschrift etwas Vorsicht angebracht: die vermeintlichen c-Zahl Matricelemente $f_{12}^{(e)}$ können dann Differentialoperatoren enthalten, weshalb ihre Lage wieder wichtig wird. Alles ist richtig, wenn man vor Einführung der Ortsdarstellung die $f_{12}^{(e)}$ so stellt, daß gleiche Indizes nebeneinander stehen; z.B. $|\psi_1^{\dagger}\rangle f_{12}^{(e)}$ und nicht $f_{12}^{(e)} |\psi_1^{\dagger}\rangle$).

Nun lassen sich aufgrund der Vertauschungsrelationen folgende Regeln leicht nachweisen:

$$(A1.7) \quad \boxed{\hat{F}^{(e)} |\psi_2^{\dagger}\rangle = |\psi_3^{\dagger}\rangle f_{32}^{(e)} \quad \text{oder} \quad \hat{F}^{(e)} |\psi^{\dagger}\rangle = |\psi^{\dagger}\rangle \cdot f^{(e)}},$$

$$(A1.8) \quad \boxed{(\psi_1^{\dagger} | \hat{F}^{(e)} = f_{13}^{(e)} (\psi_3^{\dagger} | \quad \text{oder} \quad (\psi^{\dagger} | \hat{F}^{(e)} = f^{(e)} \cdot (\psi^{\dagger} |},$$

$$(A1.9) \quad \boxed{\hat{F}^{(e)} |\psi_2\rangle = -f_{23}^{(e)} |\psi_3\rangle \quad \text{oder} \quad \hat{F}^{(e)} |\psi\rangle = -f^{(e)} \cdot |\psi\rangle},$$

$$(A1.10) \quad \boxed{(\psi_1 | \hat{F}^{(e)} = (\psi_3 | (-f_{31}^{(e)}) \quad \text{oder} \quad (\psi | \hat{F}^{(e)} = (\psi | \cdot (-f^{(e)})}.$$

Für jede (in eine Potenzreihe entwickelbare) Funktion $\chi(\hat{F}^{(e)})$ gilt demnach:

$$(A1.11) \quad \boxed{(\psi^{\dagger} | \chi(\hat{F}^{(e)}) = \chi(f^{(e)}) \cdot (\psi^{\dagger} |}$$

und

$$(A1.12) \quad \boxed{\chi(\hat{F}^{(e)}) |\psi\rangle = \chi(-f^{(e)}) \cdot |\psi\rangle}.$$

Als Anwendungsbeispiel für (A1.11) erwähnen wir den "wechselwirkungs-freien" Propagator:

$$G^{(0)}(z) = \langle \psi^+ | \frac{1}{z - \hat{H}^{(0)}} | \psi^+ \rangle = \frac{1}{z - (h^{(0)} - \mu)} \cdot \langle \psi^+ | \hat{S} | \psi^+ \rangle = \frac{1}{z - (h^{(0)} - \mu)},$$

wobei $h^{(0)}$ der Hamiltonoperator für ein einzelnes Teilchen ist (z.B.: $h^{(0)} = \vec{p}^2/(2m) + u(\vec{x})$) und dementsprechend $H^{(0)}$ der Einteilchen-Anteil des Vielteilchen-Hamiltonoperators. (μ chemisches Potential, vergl. (1.2).)

(IV) Zweiteilchen-Operatoren

Ein allgemeiner Zweiteilchen-Operator wird im Rahmen der Zweiten Quantisierung folgendermaßen durch Feldoperatoren ausgedrückt:

$$\begin{aligned} (A1.13) \quad F^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\beta, \beta'} \int d\vec{x} \int d\vec{y} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{y}) f_{\alpha\beta, \alpha'\beta'}^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}) \psi_{\beta'}(\vec{y}) \psi_{\alpha'}(\vec{x}) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \sigma_1} \sum_{\vec{k}_2, \sigma_2} \psi_{\vec{k}_1, \sigma_1}^{\dagger} \psi_{\vec{k}_2, \sigma_2}^{\dagger} \langle \vec{k}_1, \sigma_1; \vec{k}_2, \sigma_2 | f^{(2)} | \vec{k}_1', \sigma_1'; \vec{k}_2', \sigma_2' \rangle \psi_{\vec{k}_2', \sigma_2'} \psi_{\vec{k}_1', \sigma_1'}. \end{aligned}$$

In Kurzschrift lautet das einfach:

$$(A1.14) \quad F^{(2)} = \frac{1}{2} \psi_1^{\dagger} \psi_2^{\dagger} f_{12, 34}^{(2)} \psi_4 \psi_3.$$

Leider sind die Kommutatoreigenschaften eines Zweiteilchen-Operators mit den Feldoperatoren nicht mehr so einfach wie bei den Einteilchen-Operatoren (Gleichungen (A1.7) bis (A1.10)).

Mit Hilfe der nützlichen Identität

$$(A1.15) \quad \boxed{\begin{matrix} (m, n) \\ \overline{AB} \equiv m \underline{AB} + n \overline{AB} = \underline{A} \overline{B} + \overline{B} \underline{A}, \end{matrix}} \quad (k \text{ beliebig})$$

lassen sich folgende Formeln leicht zeigen ($n_{12} \equiv \psi_1^{\dagger} \psi_2$):

$$(A1.16) \quad \hat{F}^{(2)} | \psi_5^+ \rangle = | \psi_1^+ n_{24} \rangle \frac{1}{2} (f_{12, 54}^{(2)} + f_{21, 45}^{(2)}),$$

$$(A1.17) \quad \hat{F}^{(2)} | \psi_5 \rangle = -\frac{1}{2} (f_{52, 34}^{(2)} + f_{25, 43}^{(2)}) | n_{24} \psi_3 \rangle.$$

Bildet man in diesen Gleichungen Skalarprodukte mit den (Super-)Vektoren $\hat{S}^{(0)}|\psi_1^+\rangle$, so bekommt man:

$$(A1.18) \quad (\psi_1^+ | \hat{S}^{(0)} \hat{F}^{(2)} | \psi_2^+) = \langle [\psi_1, [F^{(2)}, \psi_2^-]]_\eta \rangle = \\ = \frac{1}{2} [(f_{13;24}^{(2)} + f_{31;42}^{(2)}) - \eta (f_{34;24}^{(2)} + f_{13;42}^{(2)})] \langle n_{34} \rangle$$

und

$$(A1.19) \quad (\psi_1^+ | \hat{S}^{(0)} \hat{F}^{(2)} | \psi_2) = \langle [\psi_1, [F^{(2)}, \psi_2^-]]_\eta \rangle = \\ = \eta \frac{1}{2} (f_{12;34}^{(2)} + f_{21;43}^{(2)}) \langle \psi_4 \psi_3 \rangle.$$

"Matrixelemente" von dieser Art bestimmen Hartree-Fock-Energie und Gap-Parameter in einem Vielteilchensystem (vergl. Kap. 10,11).

(V) Der Impulsoperator

Der Operator des linearen Gesamtimpulses eines Vielteilchensystems lautet bekanntlich:

$$(A1.20) \quad \vec{P} = \sum_{\alpha} \int d\vec{x} \, \psi_{\alpha}^+(\vec{x}) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{x}} \psi_{\alpha}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}, \sigma} \hbar \vec{k} \, \psi_{\vec{k}\sigma}^+ \psi_{\vec{k}\sigma}.$$

Da es sich um einen Einteilchen-Operator handelt, haben wir nach (A1.9)

$$(A1.21a) \quad \vec{P} |\psi_{\alpha}^{(+)}(\vec{x})\rangle = -\frac{1}{i} \nabla_{\vec{x}} |\psi_{\alpha}^{(+)}(\vec{x})\rangle, \quad (\kappa=1)$$

$$(A1.21b) \quad \vec{P} |\psi_{\vec{k}\sigma}^{(+)}\rangle = \hbar \vec{k} |\psi_{\vec{k}\sigma}^{(+)}\rangle,$$

oder durch Integration von (A1.21a)

$$(A1.22) \quad |\psi_{\alpha}^{(+)}(\vec{x})\rangle = e^{-i(\vec{x}-\vec{x}_0) \cdot \vec{P}} |\psi_{\alpha}^{(+)}(\vec{x}_0)\rangle.$$

Die entsprechenden Formeln für $\psi_{\alpha}^+(\vec{x})$ wurden jeweils in Klammern angedeutet. Hieraus läßt sich noch eine interessante Form für die Feldoperatoren in Impulsdarstellung finden. Wegen (A1.3a) gilt unter Benutzung der Impulseigenfunktion $\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$:

$$(A1.23) \quad \psi_{\vec{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi_{\sigma}(\vec{x}) = \mathcal{F}_{\vec{k}} \{ \psi_{\sigma}(\vec{x}) \},$$

und man bekommt durch Fouriertransformation von (A1.22):

$$(A1.24a) \quad | \psi_{\vec{k}\sigma} \rangle = \sqrt{V} \delta_{\vec{k}+\vec{P},\vec{0}} | \psi_{\sigma} \rangle$$

$$(A1.24b) \quad | \psi_{\vec{k}\sigma}^+ \rangle = \sqrt{V} \delta_{\vec{k}-\vec{P},\vec{0}} | \psi_{\sigma}^+ \rangle$$

mit

$$(A1.25) \quad \psi_{\sigma}^{(+)} = \psi_{\sigma}^{(+)}(\vec{x}=\vec{0}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}\sigma}^{(+)}.$$

(VI) Erhaltungssätze und Auswahlregeln:

Es ist bekannt, daß die Erhaltung einer additiven Variable eines Systems (z.B. Gesamtimpuls $\vec{P}$, z-Komponente des Gesamtspins, Teilchenzahl) eine entsprechende Auswahlregel für eine Korrelationsfunktion zur Folge hat. Für ein translationsinvariantes System (der Gesamtimpuls $\vec{P}$ ist erhalten, $[H, \vec{P}] = 0$) bekommt man mit Hilfe der Darstellungen (A1.22), (A1.24) und (A1.21b) sehr einfach¹⁾:

$$(A1.26a) \quad (\psi_{\alpha}^{(+)}(\vec{x}) | \mathcal{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\alpha'}^{(+)}(\vec{x}')) = (\psi_{\alpha}^{(+)}(\vec{x}-\vec{x}') | \mathcal{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\alpha'}^{(+)}),$$

$$(A1.26b) \quad (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \mathcal{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\vec{k}'\sigma'}^+) = \sqrt{V} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \mathcal{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\sigma'}^+),$$

$$(A1.26c) \quad (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \mathcal{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\vec{k}'\sigma'}^+) = \sqrt{V} \delta_{\vec{k},-\vec{k}'} (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \mathcal{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\sigma'}^+).$$

Gilt in einem System die Erhaltung der z-Komponente des Gesamtspins, d.h. $[H, S^z] = 0$, dann können wir unter Benutzung der Tatsache

$$(A1.27) \quad \hat{S}^z | \psi_{\vec{k}\sigma}^{(+)} \rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right) \sigma | \psi_{\vec{k}\sigma}^{(+)} \rangle \quad ; \quad s_z | \sigma \rangle = \sigma | \sigma \rangle,$$

folgendes schreiben:

¹⁾ Anstelle des Korrelationsoperators $\mathcal{R}^{(m,n)}(t)$ könnte auch ein anderer, mit $\vec{P}$ vertauschbarer (Super-)Operator treten! (Analoges gilt auch im folgenden für $\hat{S}^z$ und $\hat{N}$.)

$$\begin{aligned} (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \hat{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\vec{k}'\sigma'}^{(+)}) &= (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \hat{R}^{(m,n)}(t) e^{-i\varphi \hat{S}^z} e^{+i\varphi \hat{S}^z} | \psi_{\vec{k}'\sigma'}^{(+)}) = \\ &= e^{-i\varphi(\sigma_z - \sigma'_z)} (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \hat{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\vec{k}'\sigma'}^{(+)}). \end{aligned}$$

Da diese Gleichung für jedes φ richtig ist, muß die Korrelationsfunktion verschwinden, sobald $\sigma \neq \sigma'$, d.h.:

$$(A1.28) \quad (\psi_{\vec{k}\sigma}^+ | \hat{R}^{(m,n)}(t) | \psi_{\vec{k}'\sigma'}^{(+)}) \sim \delta_{\sigma, \sigma'} \quad \text{für} \quad [H, S^z] = 0.$$

Da für den Operator der Gesamtteilchenzahl N die Gleichung

$$(A1.29) \quad \hat{N} | \psi_m^{(+)}) = \bar{n} | \psi_m^{(+)})$$

gilt ($N = \sum_m \hat{n}_m \psi_m = \sum_{\alpha} \int d\vec{x} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\alpha}(\vec{x})$), kann man für ein System, in dem die Teilchenzahl eine Erhaltungsgröße ist ($[H, N] = 0$), wie oben argumentieren und bekommt:

$$(A1.30) \quad (\psi_m^+ | \hat{R}^{(\mu, \nu)}(t) | \psi_{m'}) = 0, \quad \text{wenn} \quad [H, N] \neq 0.$$

(VII) Hartree-Fock-Matrix Ω und Gap-Matrix Δ

Wir betrachten zunächst folgenden, sehr allgemeinen Vielteilchen-Hamiltonoperator:

$$(A1.31) \quad H = H^{(1)} + H^{(2)} + H_{(\eta)}$$

mit

$$a. \quad H^{(1)} = \psi_1^{\dagger} (h_{12} - \mu \delta_{12}) \psi_2$$

$$b. \quad H^{(2)} = \frac{1}{2} \psi_1^{\dagger} \psi_2^{\dagger} h_{12;34} \psi_4 \psi_3 \quad \text{mit} \quad h_{12;34}^{(2)} = h_{21;43}^{(2)}$$

$$c. \quad H_{(\eta)} = \begin{cases} b_1 \psi_1 + b_1^* \psi_1^{\dagger} & \text{für } \eta = -1 \text{ (Bosonen)} \\ f_{12} \psi_1 \psi_2 + f_{12}^* \psi_2^{\dagger} \psi_1^{\dagger} & \text{für } \eta = +1 \text{ (Fermionen)} \end{cases}$$

mit: $f_{12} = f_{21}$.

Darin bedeuten $H^{(1)}$ und $H^{(2)}$ die gewöhnliche Ein- und Zweiteilchen-Wechselwirkungsenergie, während der Zusatzterm H_{η} die Gesamtteilchenzahl verändert, also

$$(A1.32) \quad [H, N]_- \neq 0$$

bewirkt. Deshalb darf man erwarten, daß jetzt auch Korrelationsfunktionen vom Typ (A1.30) von Null verschieden sein können.

Die Wahl (A1.31c) für den Zusatzterm, der ja nur die Nichterhaltung der Teilchenzahl garantieren soll, wird durch die angenehme Eigenschaft¹⁾

$$(A1.33) \quad (\psi^+ | \hat{H}_{(\eta)} | \psi^{(1)}) = 0$$

begründet, die sich einfach mit Hilfe des zu (A1.31c) gehörigen Liouville-operators

$$(A1.34) \quad \hat{H}_{(\eta)} = \begin{cases} b_1 \hat{\psi}_1 + b_1^* \hat{\psi}_1^+ & \text{für } \eta = -1 \text{ (Bosonen)} \\ f_{12} \hat{\psi}_1 \hat{\psi}_2 + f_{12}^* \hat{\psi}_2^+ \hat{\psi}_1^+ & \text{für } \eta = +1 \text{ (Fermionen)} \end{cases}$$

verifizieren läßt.

Das Verschwinden der Skalarprodukte (A1.33) bedeutet, daß der Zusatzterm im Hamiltonoperator, H_{η} , weder im Hartree-Fock-Frequenzoperator

$$(A1.35a) \quad \Omega = (\psi^+ | \hat{H} | \psi^+) = h^{(1)} - \mu + (\psi^+ | \hat{H}^{(2)} | \psi^+)$$

noch im "Gap-Operator" (vergl. Kap. 11)

$$(A1.35b) \quad \Delta = \eta (\psi^+ | \hat{H} | \psi) = \eta (\psi^+ | \hat{H}^{(2)} | \psi)$$

¹⁾ Um die "Entartung des statistischen Gleichgewichtszustands" (vergl. N.N. Bogoliubov [12], S. 1ff) aufzuheben, benutzt man in einem Heisenberg-Spinsystem ebenfalls einen möglichst einfachen Zusatzterm - nämlich ein kleines Magnetfeld in z-Richtung.

explizit in Erscheinung tritt. Er bewirkt nur, daß man jetzt nicht mehr von vornherein wegen (A1.30) auf das Verschwinden von Δ schließen muß.

Mit Hilfe der Formeln (A1.18,19) lassen sich die Matrixelemente von Ω und Δ leicht angeben:

$$(A1.36a) \quad \Omega_{12} = h_{12}^{(1)} - \mu \delta_{12} + (h_{13;24}^{(2)} - \eta h_{13;42}^{(2)}) < \psi_3^+ \psi_4 >$$

$$(A1.36b) \quad \Delta_{12} = h_{12;34}^{(2)} < \psi_4 \psi_3 > .$$

Wir wollen diese Matrixelemente jetzt noch für einige Spezialfälle in der Orts- und Impulsdarstellung angeben:

a. Spinunabhängiges Zweiteilchen-Potential $v(\vec{x}_1; \vec{x}_2)$ und beliebiges Ein-
teilchen-Potential $u_{\alpha\alpha'}(\vec{x})$:

Wegen

$$(A1.37) \quad < \vec{x}_1 \alpha_1; \vec{x}_2 \alpha_2 | h^{(2)} | \vec{x}_3 \alpha_3; \vec{x}_4 \alpha_4 > = v(\vec{x}_1; \vec{x}_2) \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_3) \delta_{\alpha_2 \alpha_4} \delta(\vec{x}_2 - \vec{x}_4)$$

haben wir dann¹⁾:

$$(A1.38a) \quad < \vec{x} \alpha | \Omega | \vec{x}' \alpha' > = \left(-\frac{\nabla_{\vec{x}}^2}{2m} - \mu \right) \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') + u_{\alpha\alpha'}(\vec{x}) \delta(\vec{x} - \vec{x}') + \\ + \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \int d\vec{y} v(\vec{x}; \vec{y}) < N(\vec{y}) > - \eta v(\vec{x}; \vec{x}') < \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}') \psi_{\alpha}(\vec{x}) >$$

und

$$(A1.38b) \quad < \vec{x} \alpha | \Delta | \vec{x}' \alpha' > = v(\vec{x}; \vec{x}') < \psi_{\alpha'}^+(\vec{x}') \psi_{\alpha}(\vec{x}) > .$$

b. Für ein homogenes System (räumlich konstantes äußeres Feld und nur vom Abstand abhängiges Zweiteilchen-Potential $v(|\vec{x} - \vec{y}|)$), bei dem außerdem die z-Komponente des Gesamtspins erhalten bleibt, bekommt man:

$$(A1.39a) \quad < \vec{x} \alpha | \Omega | \vec{x}' \alpha' > = \delta_{\alpha\alpha'} \left\{ \left[-\frac{\nabla_{\vec{x}}^2}{2m} - \mu + u_{\alpha} + \tilde{v}(\vec{x}) < N > \right] \delta(\vec{x} - \vec{x}') - \eta v(|\vec{x} - \vec{x}'|) < \psi_{\alpha'}^+(\vec{x} - \vec{x}') \psi_{\alpha} > \right\} ,$$

1) Für Teilchen der Ladung q im elektromagnetischen Feld $\{ \vec{A}(\vec{x}), \varphi(\vec{x}) \}$

ist zu ersetzen: $-\frac{1}{2m} \nabla_{\vec{x}}^2 \longrightarrow \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{i} \nabla_{\vec{x}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}) \right]^2 + q \varphi(\vec{x}) .$

$$(A1.39b) \quad \langle \vec{x} | \Delta | \vec{x}' \rangle = \delta_{\vec{x}, -\vec{x}'} v(|\vec{x} - \vec{x}'|) \langle \psi_{-\vec{x}} | \psi_{\vec{x}}(\vec{x} - \vec{x}') \rangle.$$

In diesem Fall bekommen wir wegen (A1.26) in der Impulsbasis:

$$(A1.40a) \quad \langle \vec{k} \sigma | \Omega | \vec{k}' \sigma' \rangle = \delta_{\sigma \sigma'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \Omega_{\sigma}(\vec{k})$$

$$\text{mit} \quad \Omega_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{k^2}{2m} - \mu + u_{\sigma} + \tilde{v}(\sigma) \langle N \rangle - \eta \sum_{\vec{k}_1} \sqrt{V} \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) \langle \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\vec{k}_1 \sigma} \rangle,$$

$$\text{und} \quad (A1.40b) \quad \langle \vec{k} \sigma | \Delta | \vec{k}' \sigma' \rangle = \delta_{\sigma, -\sigma'} \delta_{\vec{k}, -\vec{k}'} \Delta_{\sigma}(\vec{k})$$

$$\text{mit} \quad \Delta_{\sigma}(\vec{k}) = \sqrt{V} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) \langle \psi_{-\sigma} | \psi_{\vec{k}_1 \sigma} \rangle.$$

Darin bedeutet:

$$(A1.41) \quad N(\vec{y}) = \sum_{\vec{p}} \psi_{\vec{p}}^{\dagger}(\vec{y}) \psi_{\vec{p}}(\vec{y}) ; \quad N = \int d\vec{y} N(\vec{y}) ;$$

$$(A1.42) \quad \tilde{v}(\vec{k}) = \frac{1}{V} \int d\vec{x} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} v(|\vec{x}|) = \tilde{v}(-\vec{k}) = \tilde{v}^*(\vec{k}).$$

Wir erwähnen noch, daß $\Omega_{\sigma}(\vec{k})$ reell ist (Diagonalelement eines hermiteschen Operators),

$$(A1.43) \quad \Omega_{\sigma}^*(\vec{k}) = \Omega_{\sigma}(\vec{k}),$$

und ferner gilt wegen

$$(A1.44a) \quad \Delta_{12} = -\eta \Delta_{21} \quad \text{bzw.} \quad \Delta = -\eta \Delta^T$$

auch die Beziehung

$$(A1.44b) \quad \Delta_{\sigma}(\vec{k}) = -\eta \Delta_{-\sigma}(-\vec{k}).$$

A2. SUPEROPERATOREN IM MAGNETISMUS

(I) Gitter-fouriertransformierte Spinoperatoren und Vertauschungsrelationen:

Wir betrachten die Operatoren

$$(A2.1) \quad S_j^{(\alpha)} = \begin{cases} S_j^x \pm i S_j^y & \text{für } \alpha = \pm 1 \\ S_j^z & \text{für } \alpha = 0 \end{cases},$$

wobei $\vec{S}_j$ der Spin(vektor)-Operator des Gitterplatzes $\vec{R}_j$ ist; ferner benutzen wir auch die sogenannten "gitter-fouriertransformierten" Spinoperatoren:

$$(A2.2a) \quad S_{\vec{k}}^{(\alpha)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} S_j^{(\alpha)},$$

$$(A2.2b) \quad S_j^{(\alpha)} = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} S_{\vec{k}}^{(\alpha)}.$$

Darin ist $\vec{k}$ ein Wellenzahlvektor, und die Summe erstreckt sich über die $\vec{k}$ -Werte der ersten Brillouin-Zone. Es ist

$$(A2.3) \quad (S_j^{(\alpha)})^+ = S_j^{(-\alpha)} \quad \text{und} \quad (S_{\vec{k}}^{(\alpha)})^+ = S_{-\vec{k}}^{(-\alpha)},$$

und die Vertauschungsrelationen lauten

$$(A2.4a) \quad [S_i^{(\alpha)}, S_j^{(\beta)}]_- = (\alpha - \beta)(-1)^{\alpha+\beta} \delta_{ij} S_j^{(\alpha+\beta)},$$

$$(A2.4b) \quad [S_{\vec{k}}^{(\alpha)}, S_{\vec{k}'}^{(\alpha')}]_- = (\alpha - \alpha')(-1)^{\alpha+\alpha'} \frac{1}{N} S_{\vec{k}+\vec{k}'}^{(\alpha+\alpha')},$$

was sich mit Hilfe der Drehimpuls-Vertauschungsrelationen und der Definitionen (A2.1,2) verifizieren läßt. Ein Skalarprodukt transformiert sich wie folgt:

$$(A2.5) \quad \sum_{j=1}^N \vec{A}_j \cdot \vec{B}_j = \sum_{j,\alpha} \frac{(2-\alpha^2)}{2} A_j^{(\alpha)} B_j^{(-\alpha)} = \\ = N \sum_{\vec{k},\alpha} \frac{(2-\alpha^2)}{2} A_{\vec{k}}^{(\alpha)} B_{-\vec{k}}^{(-\alpha)} = N \sum_{\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}} \cdot \vec{B}_{-\vec{k}}.$$

(II) Heisenberg- und Ising-Liouvilleoperator

Zum isotropen Heisenberg-Modell

$$(A2.6) \quad H_{\text{Heis}} = -g\mu_B h \sum_{j=1}^N S_j^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

($v_{ij} = v_{ji}$; $v_{ii} = 0$) lautet der Liouvilleoperator

$$(A2.7) \quad \begin{aligned} \hat{H}_{\text{Heis}} &= -g\mu_B \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \vec{H}_j \cdot \vec{S}_j = \\ &= -g\mu_B h \sum_{j=1}^N \hat{S}_j^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \end{aligned}$$

mit dem "Operator des Magnetfeldes am Ort $\vec{R}_j$ ":

$$(A2.8) \quad \vec{H}_j = \vec{h} \cdot 1 + \frac{1}{g\mu_B} \sum_{i=1}^N v_{ij} \vec{S}_i, \quad \vec{h} = (0, 0, h)$$

Dabei wurde die Formel

$$(A2.9) \quad \sum_{i,j} \widehat{\vec{S}_i \cdot I_{ij} \vec{S}_j} = \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot I_{ij} \vec{S}_j$$

benutzt, die für einen symmetrischen Tensor $I_{ij}^{\mu\mu'} = I_{ji}^{\mu'\mu}$ gilt. Der Ising-Hamiltonoperator unterscheidet sich von (A2.6) nur dadurch, daß die Vektoren $\vec{S}_i$ durch ihre z-Komponenten ersetzt sind:

$$(A2.10) \quad H_{\text{Ising}} = -g\mu_B h \sum_{j=1}^N S_j^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} S_i^{(0)} S_j^{(0)}$$

$$(A2.11a) \quad \begin{aligned} \hat{H}_{\text{Ising}} &= -g\mu_B \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \vec{H}_j \cdot \hat{S}_j^{(0)} = \\ &= -g\mu_B h \sum_{j=1}^N \hat{S}_j^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} \vec{S}_i^{(0)} \cdot \hat{S}_j^{(0)} \end{aligned}$$

mit

$$(A2.11b) \quad \vec{H}_j^{(0)} = h + \frac{1}{g\mu_B} \sum_{i=1}^N v_{ij} S_i^{(0)}$$

Mit Hilfe von (A2.5) lassen sich die Liouvilleoperatoren auch in der Fourierdarstellung schreiben (Oberflächeneffekte bleiben unberücksichtigt):

$$(A2.12) \quad \hat{H}_{\text{Heis}} = -g\mu_B \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \vec{H}_j \cdot \vec{S}_j = -g\mu_B \frac{N}{2} \sum_{\vec{k}} \vec{H}_{\vec{k}} \cdot \vec{S}_{-\vec{k}},$$

$$(A2.13) \quad \hat{H}_{\text{Ising}} = -g\mu_B \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \hat{H}_j^{(0)} \hat{S}_j^{(0)} = -g\mu_B \frac{N}{2} \sum_{\vec{k}} \hat{H}_{\vec{k}}^{(0)} \hat{S}_{-\vec{k}}^{(0)} .$$

Darin ist

$$(A2.14a) \quad \hat{H}_{\vec{k}}^{(0)} = 2h \delta_{\alpha,0} \delta_{\vec{k},\vec{0}} + \frac{1}{g\mu_B} \tilde{v}(\vec{k}) \hat{S}_{\vec{k}}^{(0)} ,$$

mit (alle Gitterplätze äquivalent, d.h. Randpunkte werden vernachlässigt)

$$(A2.14b) \quad \tilde{v}(\vec{k}) = \sum_{j=1}^N v_{ij} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} = \tilde{v}(-\vec{k}) = \tilde{v}^*(\vec{k}) .$$

(III) "Bewegungsgleichungen":

Wendet man den Liouvilleoperator (A2.12) auf $|S_{\vec{k}'}^{(\pm)}\rangle$ an, so ergibt sich

$$(A2.15a) \quad \hat{H}_{\text{Heis}} |S_{\vec{k}'}^{(0)}\rangle = \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}_1; \vec{k}') \hat{S}_{\vec{k}_1}^{(-)} |S_{\vec{k}' - \vec{k}_1}^{(+)}\rangle ,$$

$$(A2.15b) \quad \hat{H}_{\text{Heis}} |S_{\vec{k}'}^{(\pm)}\rangle = \mp g\mu_B h |S_{\vec{k}'}^{(\pm)}\rangle \mp \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}_1; \vec{k}') \hat{S}_{\vec{k}_1}^{(0)} |S_{\vec{k}' - \vec{k}_1}^{(\pm)}\rangle .$$

mit der Abkürzung:

$$(A2.16) \quad \tilde{v}(\vec{k}_1; \vec{k}) = \tilde{v}(\vec{k}_1) - \tilde{v}(\vec{k} - \vec{k}_1) .$$

Und für das Ising-Modell:

$$(A2.17a) \quad \hat{H}_{\text{Ising}} |S_{\vec{k}'}^{(0)}\rangle = 0$$

$$(A2.17b) \quad \hat{H}_{\text{Ising}} |S_{\vec{k}'}^{(\pm)}\rangle = \mp g\mu_B h |S_{\vec{k}'}^{(\pm)}\rangle \mp \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1} \tilde{v}(\vec{k}_1) \hat{S}_{\vec{k}_1}^{(0)} |S_{\vec{k}' - \vec{k}_1}^{(\pm)}\rangle .$$

Für langsam veränderliches $\tilde{v}(\vec{k})$ ist $\tilde{v}(\vec{k}_1; \vec{k})$ klein, während $\tilde{v}(\vec{k}_1)$ nicht klein zu sein braucht!

In der Ortsdarstellung lauten die Gleichungen (A2.15):

$$(A2.18a) \quad \hat{H}_{\text{Heis}} |S_j^{(0)}\rangle = \frac{1}{4} \sum_{l=1}^N \{ v_{lj} \hat{S}_l^{(-)} |S_j^{(+)}\rangle - v_{lj} \hat{S}_l^{(+)} |S_j^{(-)}\rangle \}$$

$$(A2.18b) \quad \hat{H}_{\text{Heis}} |S_j^{(\pm)}\rangle = \mp g\mu_B h |S_j^{(\pm)}\rangle \mp \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N v_{lj} \{ \hat{S}_l^{(0)} |S_j^{(\pm)}\rangle - \hat{S}_j^{(0)} |S_l^{(\pm)}\rangle \} ,$$

während sich für das Ising-Modell die einfachen Formen

$$(A2.19a) \quad \hat{H}_{\text{Ising}} |S_j^{(0)}\rangle = 0 \quad ,$$

$$(A2.19b) \quad \hat{H}_{\text{Ising}} |S_j^{(\pm)}\rangle = \mp \frac{1}{2} g \mu_B \hat{H}_j^{(0)} |S_j^{(\pm)}\rangle = \\ = \mp g \mu_B h |S_j^{(\pm)}\rangle \mp \frac{1}{2} \sum_l v_{lj} \hat{S}_l^{(0)} |S_j^{(\pm)}\rangle$$

ergeben. Der Operator $H_j^{(0)}$ ("Operator des Magnetfeldes am Ort $\vec{R}_j$ ") hat im Ising-Modell die bemerkenswerte Eigenschaft

$$(A2.20a) \quad [H_j^{(0)}, \hat{S}_j^{\pm}] = 0$$

und ist außerdem Konstante der Bewegung:

$$(A2.20b) \quad [H_j^{(0)}, H_{\text{Ising}}] = 0 \quad .$$

Die erste Eigenschaft folgt aus $v_{ii} = 0$ und die andere daraus, daß sowohl H_{Ising} als auch $H_j^{(0)}$ nur z-Komponenten von Spinoperatoren enthalten. Aus den Formeln (A2.19), (A2.20) erhält man für eine Funktion ψ sehr einfach die Beziehung:

$$(A2.21) \quad \left\{ \hat{H}_{\text{Ising}} |S_j^{(0)}\rangle = \psi(-g \mu_B \frac{1}{2} \hat{H}_j^{(0)}) |S_j^{(0)}\rangle = |S_j^{(0)}\rangle \psi(-g \mu_B H_j^{(0)}) \right\}$$

Wegen seiner Vertauschungsrelationen verhält sich der Operator $H_j^{(0)}$ in (A2.21) wie ein "Eigenwert".

(VI) Magnetisierung im Molekularfeld-Modell; Brillouin-Funktion:

In Molekularfeld-Approximation gilt sowohl für den Ising- als auch für den Heisenberg-Hamiltonoperator:

$$(A2.22a) \quad H \stackrel{\text{MFA}}{\approx} -g \mu_B \sum_{j=1}^N \langle H_j^{(0)} \rangle S_j^{(0)} + \text{c-Zahl} \quad ,$$

wobei die c-Zahl Doppelzählung korrigiert¹⁾:

1) Bei der Berechnung der Magnetisierung durch Differentiation der Zustandssumme fällt diese c-Zahl heraus.

$$(A2.22b) \quad c\text{-Zahl} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} \langle S_i^{(o)} \rangle \langle S_j^{(o)} \rangle .$$

Man betrachtet deshalb oft ein gesondertes Molekularfeld-Modell (Weiss-Modell):

$$(A2.23) \quad H_{\text{mol}} = -g\mu_B \sum_{j=1}^N (h_j + H_j^{\text{mol}}) S_j^{(o)}$$

mit dem äußeren Feld h_j und dem Molekularfeld H_j^{mol} am Ort $\vec{R}_j$. Der Hamiltonoperator (A2.23) hat den großen Vorteil, daß sich die Zustandssumme exakt berechnen läßt - durch die Einführung des Molekularfeldes hat man das Vielteilchen-Problem reduziert; die Zustandssumme lautet:

$$(A2.24) \quad Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta H_{\text{mol}}} \} = \prod_{j=1}^N \text{Tr}_j \{ e^{\beta g\mu_B (h_j + H_j^{\text{mol}}) S_j^{(o)}} \} = \\ = \prod_{j=1}^N \frac{\sinh[\frac{2S+1}{2S} \beta g\mu_B S (h_j + H_j^{\text{mol}})]}{\sinh[\frac{1}{2S} \beta g\mu_B S (h_j + H_j^{\text{mol}})]} .$$

Hieraus läßt sich die Magnetisierung nach der Formel¹⁾

$$(A2.25) \quad M = \sum_{j=1}^N g\mu_B \langle S_j^{(o)} \rangle = g\mu_B \sum_{j=1}^N \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial (g\mu_B h_j)} \ln Z$$

bestimmen, und man bekommt für das Molekularfeld-Modell

$$(A2.26) \quad M_{\text{mol}} = g\mu_B S \sum_{j=1}^N B_S(\beta g\mu_B (h_j + H_j^{\text{mol}}) S) = \\ = g\mu_B N S B_S(\beta g\mu_B (h + H^{\text{mol}}) S) \quad (\text{für homogene Felder})$$

mit der Brillouin-Funktion $B_S(y)$:

$$(A2.27) \quad B_S(y) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S} y\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{1}{2S} y\right)$$

und

$$(A2.28) \quad B_{1/2}(y) = \tanh(y) .$$

¹⁾ N sei die Zahl der Spins pro Volumeneinheit.

A3. SUPEROPERATOREN UND LINEARE ANTWORTTHEORIE

Vorgelegt sei ein System, welches zu Zeiten $t \leq t_0$ durch die Gleichgewichtsdichtematrix

$$(A3.1) \quad \varrho = \bar{e}^{\beta H} / \text{Tr}\{\bar{e}^{\beta H}\} \quad ; \quad \varrho_t = \varrho \text{ für } t < t_0$$

beschrieben wird. Zur Zeit t_0 werde dann eine (zeitabhängige) äußere Störung V_t eingeschaltet; dann lautet der Hamiltonoperator

$$(A3.2) \quad H_t = H + V_t \quad ; \quad V_t = 0 \text{ für } t < t_0 \quad ,$$

und die Dichtematrix des Systems ist:

$$(A3.3) \quad |\varrho_t) = \Omega_{t'}^t(-i\hat{H}_\tau) |\varrho) \quad , \quad (t' \leq t_0) \quad .$$

(Darin ist $\Omega_{t'}^t(P) = 1 + \int_{t'}^t d\tau P(\tau) + \int_{t'}^t d\tau \int_{t'}^\tau d\tau' P(\tau) P(\tau') + \dots$ die "zeitgeordnete Exponentialfunktion" (Matrizant).)

Der Erwartungswert irgendeines Operators B schreibt sich

$$(A3.4) \quad \langle B \rangle_t = \text{Tr}\{B \varrho_t\} = \text{Tr}\{B(t) \varrho\} = \text{Tr}\{B(t-t_0) \varrho_{t-t_0}\}$$

mit

$$(A3.5) \quad |B(t)) = e^{it\hat{H}} |B),$$

Operator B in "Wechselwirkungsdarstellung".

(In diesem Kapitel wird a. explizite (Schrödinger-)Zeitabhängigkeit von Operatoren durch Index t , b. Heisenberg-Zeitabhängigkeit durch $\{t\}$ und c. Wechselwirkungsbild-Zeitabhängigkeit durch (t) gekennzeichnet.)

Ersetzt man in (A3.4) ϱ_{t-t_0} durch ϱ ¹⁾, so hat man nur die ungestörte Bewegung des Systems berücksichtigt; die lineare Antworttheorie besteht nun darin, ϱ_{t-t_0} nach $\hat{V}$ zu entwickeln und nur den in V linearen Term beizubehalten. Laut Definition (A3.5) ist

1) Bei dem in (A3.1) angenommenen stationären ϱ würde dann allerdings $\langle B \rangle_t = \text{const.}$

$$(A3.6) \quad |g_t(t-t_0)\rangle = e^{i(t-t_0)\hat{H}} |g_t\rangle = e^{i(t-t_0)\hat{H}} \Omega_{t'}^{\dagger}(-i\hat{H}_{t'})|g\rangle = \\ = \Omega_{t'}^{\dagger}(-i\hat{V}_t(t-t_0))|g\rangle.$$

Damit läßt sich (A3.4) als (Super-)Matrizelement schreiben:

$$(A3.7) \quad \langle B \rangle_t = \langle B^{\dagger}(t-t_0) | \Omega_{t'}^{\dagger}(-i\hat{V}_t(t-t_0)) | g \rangle.$$

Solange $t' \leq t_0$, ist dieser Ausdruck unabhängig von t' , und man kann $t' = -\infty$ setzen. Die Entwicklung des Matrizanten lautet:

$$(A3.8) \quad \langle B \rangle_t = \langle B \rangle + \int_{-\infty}^t dt' (-i) \langle B^{\dagger}(t-t_0) | \hat{V}_{t'}(t-t_0) | g \rangle + \dots \\ = \langle B \rangle + \int_{-\infty}^t dt' \frac{1}{i} \langle [B(t-t_0), V_{t'}(t-t_0)]_- \rangle + \dots,$$

wo der Erwartungswert $\langle B \rangle$ mit dem statistischen Operator (A3.1) zu nehmen ist. Man betrachtet meistens die Abweichung $\delta B = B - \langle B \rangle$ und bekommt, wenn man speziell

$$(A3.9) \quad \dot{V}_t = a(t) A \quad (a(t) \text{ ist c-Zahl Funktion})$$

annimmt

$$(A3.10) \quad \langle \delta B \rangle_t \cong \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \frac{\theta(t-t')}{i} \langle [\delta B(t-t'), \delta A]_- \rangle a(t').$$

Fouriertransformation dieser Gleichung ergibt

$$(A3.11) \quad \langle \delta B \rangle_{\omega} = \chi_{BA}(\omega) a(\omega)$$

mit der Suszeptibilität

$$(A3.12) \quad \chi_{BA}(t) \equiv \frac{\theta(t)}{i} \langle [\delta B(t), \delta A]_- \rangle.$$

Handelt es sich bei der Störung speziell um ein Magnetfeld $\vec{h}(t)$, so lautet die Abweichung der Magnetisierung vom Gleichgewichtswert in linearer Näherung:

$$(A3.13) \quad \langle \delta \vec{M} \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi(t-t') \cdot \vec{h}(t')$$

mit dem dynamischen magnetischen Suszeptibilitätstensor:

$$(A3.14) \quad \chi(t) = -(\delta \vec{M} | \hat{K}_1^{(-1)}(t) | \delta \vec{M}) .$$

Die dynamische Suszeptibilität darf nicht mit der isothermen Suszeptibilität verwechselt werden. Letztere ist durch die Gleichung

$$(A3.15) \quad \delta \langle \vec{M} \rangle_{\vec{h}} = \chi^T \cdot \delta \vec{h}$$

definiert; sie gibt die Änderung der Magnetisierung bei infinitesimaler Änderung eines konstanten, äußeren Feldes $\vec{h}$ an. Mit

$$(A3.16) \quad H(\vec{h}) = H - \vec{h} \cdot \vec{M} \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial h_\mu} g(\vec{h}) = \int_0^\beta d\lambda \, \delta M_\mu \{i\lambda\} g(\vec{h})$$

$$(\vec{M} \{i\lambda\} = e^{-\lambda H(\vec{h})} \vec{M} e^{\lambda H(\vec{h})}; \quad g(\vec{h}) = e^{-\beta H(\vec{h})} / \text{Tr} \{ e^{-\beta H(\vec{h})} \})$$

wird

$$(A3.17) \quad \chi_{\mu\nu}^T = \left[\frac{\partial}{\partial h_\mu} \langle M_\nu \rangle_{\vec{h}} \right]_{\vec{h}=\vec{0}} = \int_0^\beta d\lambda \, (\delta M_\mu | \bar{g} e^{-\lambda \hat{H}} | \delta M_\nu) .$$

Der Zusammenhang zwischen der isothermen und der dynamischen Suszeptibilität läßt sich leicht durch Fouriertransformation von (A3.14) (s. Gleichung (3.2)) und mit Hilfe des Theorems (4.7) herstellen:

$$(A3.18a) \quad \chi(\omega=0) = \int_0^\beta d\lambda \, (\delta \vec{M} | \frac{\hat{H}}{\hat{H} - i\varepsilon} e^{-\lambda \hat{H}} \bar{g} | \delta \vec{M}) ;$$

daraus ist zu ersehen

$$(A3.18b) \quad \chi(\omega=0) = \chi^T \quad \text{für} \quad [H, \vec{M}] \neq 0 ;$$

ist allerdings $[H, M_\mu] = 0$ für die Komponente M_μ , dann ist - wie (3.18a) zeigt - $\chi_{\mu\nu}(\omega=0) = 0 = \chi_{\nu\mu}(\omega=0)$, während $\chi_{\mu\nu}^T$ sehr wohl von Null verschieden sein kann!

A4. BEWEGUNGSGLEICHUNGEN FÜR EINEN SATZ VON OPERATOREN

Gibt man sich irgendeinen idempotenten Operator $\mathcal{P}$ ($\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$) und sein Komplement $Q = 1 - \mathcal{P}$ vor, so kann man folgende Bewegungsgleichungen für den Operator e^{itL} angeben¹⁾:

$$(A4.1) \quad \frac{d}{dt} e^{itL} = iL \mathcal{P} e^{itL} - \int_0^t d\tau L Q e^{i(t-\tau)QLQ} Q L \mathcal{P} e^{i\tau L} + iL Q e^{itQLQ};$$

$$(A4.2) \quad \frac{d}{dt} e^{itL} = i e^{itL} \mathcal{P} L - \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)L} \mathcal{P} L Q e^{i\tau QLQ} Q L + i e^{itQLQ} Q L.$$

Ferner gelten die Integralgleichungen:

$$(A4.3) \quad e^{itL} = \mathcal{P} e^{itL} + Q e^{itQLQ} + i \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)QLQ} Q L \mathcal{P} e^{i\tau L}$$

$$(A4.4) \quad e^{itL} = e^{itL} \mathcal{P} + e^{itQLQ} Q + i \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)L} \mathcal{P} L Q e^{i\tau QLQ}.$$

Diese Identitäten wurden in Form ihrer Laplacetransformierten schon im Kap. 8 benutzt. Zum Beweis geht man am besten von den leicht zu verifizierenden Gleichungen

$$(L = L' + L''; L' = \mathcal{P} L \mathcal{P} + Q L Q; L'' = \mathcal{P} L Q + Q L \mathcal{P})$$

$$(A4.5) \quad \mathcal{P} L' = \mathcal{P} L \mathcal{P} - L' \mathcal{P} \quad ; \quad \mathcal{P} L'' = \mathcal{P} L Q = L'' Q$$

$$Q L' = Q L Q - L' Q \quad ; \quad Q L'' = Q L \mathcal{P} = L'' \mathcal{P},$$

$$(A4.6) \quad e^{itL} = e^{itL'} + i \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)L'} L'' e^{i\tau L},$$

$$(A4.7) \quad e^{itL} = e^{itL'} + i \int_0^t d\tau e^{i(t-\tau)L} L'' e^{i\tau L'},$$

$$(A4.8) \quad \frac{d}{dt} e^{itL} = iL \mathcal{P} e^{itL} + iL Q e^{itL}; \quad e^{itL} = \mathcal{P} e^{itL} + Q e^{itL},$$

$$(A4.9) \quad \frac{d}{dt} e^{itL} = i e^{itL} \mathcal{P} L + i e^{itL} Q L; \quad e^{itL} = e^{itL} \mathcal{P} + e^{itL} Q$$

aus. Setzt man (A4.6,7) in (A4.8,9) ein und berücksichtigt (A4.5) (es wird jeweils nur der Term mit Q in (A4.8,9) ersetzt), so erhält man (A4.1,2) bzw. (A4.3,4).

¹⁾ Die Bewegungsgleichungen lassen sich ohne Schwierigkeiten auf zeitgeordnete Exponentialfunktionen verallgemeinern [4].

Wendet man die Operatoridentitäten (A4.1,2) auf irgendeinen (Super-)Vektor $|A_j\rangle$ (bzw. den Dichteoperator $|\rho\rangle$) an und identifiziert $L \equiv \hat{H}$ mit dem Liouvilleoperator (bzw. $L \equiv -\hat{H}$ im Falle von $|\rho\rangle$) eines physikalischen Systems, so bekommt man eine Bewegungsgleichung für den (Heisenberg-) Operator $|A_j(t)\rangle$.

Anstelle eines einzigen Elements $|A_j\rangle$ wollen wir jetzt einen ganzen "Satz von linear unabhängigen Operatoren" $\{|A_j\rangle; j=1,2,\dots,n\}$ betrachten, den wir uns als Zeilenvektor hingeschrieben denken:

$$(A4.10) \quad |A\rangle = \{|A_1\rangle, |A_2\rangle, \dots, |A_n\rangle\}.$$

Die n Elemente $\{|A_j\rangle; j=1,2,\dots,n\}$ spannen einen n -dimensionalen Unterraum von $\mathcal{L}$, dem Raum aller linearen Operatoren, auf. Der Projektor auf diesen Unterraum ist:

$$(A4.11) \quad \mathcal{P}_A = |A\rangle \cdot (A|A)^{-1} \cdot (A| = \sum_{ij=1}^n |A_j\rangle [(A|A)^{-1}]_{ij} \langle A_j|.$$

Darin ist $|A\rangle$ ein n -dimensionaler Zeilenvektor mit Komponenten $|A_i\rangle$, und $(A|$ ein Spaltenvektor mit Komponenten $\langle A_i|$, d.h. $(A|A)$ ist eine $n \times n$ -Matrix mit Elementen $\langle A_i|A_j\rangle$.¹⁾

Wendet man die Operatorgleichung (A4.2) auf den Ket $|A\rangle$ an und wählt $\mathcal{P} = \mathcal{P}_A$ und $L = \hat{H}$, dann bekommt man die von Mori [9] hergeleitete Bewegungsgleichung für einen Satz von Operatoren:

$$(A4.12) \quad \frac{d}{dt} |A(t)\rangle - i |A(t)\rangle \cdot \omega + \int_0^t d\tau |A(\tau)\rangle \cdot \varphi(t-\tau) = |A_0(t)\rangle$$

mit

$$(A4.13) \quad i\omega = i (A|A)^{-1} \cdot (A|\hat{H}|A) = (A|A)^{-1} \cdot (A|\dot{A});$$

$$(A4.14) \quad |A_0(t)\rangle = e^{itL_1} |A_0\rangle = e^{itQ_A \hat{H} Q_A} i Q_A \hat{H} |A\rangle,$$

¹⁾ Die inverse Matrix $(A|A)^{-1}$ existiert genau dann, wenn die $|A_i\rangle, i=1,\dots,n$ linear unabhängig sind (weil genau dann die Gramsche Determinante $\text{Det}\{(A|A)\}$ von Null verschieden ist. Siehe z.B. [27], S. 228ff.)

$$(A4.15) \quad L_A = Q_A \hat{H} Q_A ; \quad |A_{(t)}\rangle = i Q_A \hat{H} |A\rangle ;$$

$$(A4.16) \quad \varphi(t) = (A|A)^{-1} \cdot (A_{(t)}|A_{(t)}(t)) \quad . \quad 1)$$

Die Metrik im Raum $\mathcal{L}$ haben wir bisher noch nicht spezifiziert. Neben den üblichen Bedingungen für eine unitäre Metrik fordern wir nur, daß sie den Liouvilleoperator $\hat{H}$ hermitesch läßt:

$$(A4.17) \quad \hat{H}^\dagger = \hat{H} .$$

Diese Bedingung ist von der Mori-Wilcox-Metrik [9] und von der Schwegler-Metrik [28] erfüllt.

Wegen $\mathcal{P}Q = 0$ ist

$$(A4.18) \quad (A|A_{(t)}(t)) = 0 ,$$

und man bekommt durch Anwendung von $(A|$ auf (A4.12)

$$(A4.19) \quad \frac{d}{dt} K(t) - i K(t) \cdot \omega + \int_0^t d\tau K(\tau) \cdot \varphi(t-\tau) = 0$$

bzw. nach Laplacetransformation:

$$(A4.20) \quad K(p) = \frac{1}{p - i\omega + \varphi(p)} ; \quad K(t) = (A|A)^{-1} \cdot (A|A(t)) .$$

Die von Mori [11] für $K(p)$ angegebene Kettenbruch-Entwicklung ist vollkommen analog zu der im Kap. 9; wir geben sie deshalb hier nicht an.

Wir bemerken noch, daß der Projektor (A4.11) in Verbindung mit der gewöhnlichen Spurmetrik (2.1) in Systemen unendlicher Dimension nicht geeignet ist, weil $(A|A)$ unter Umständen nicht beschränkt ist. In der Mori-Wilcox-Metrik

$$(A4.21) \quad \begin{aligned} \langle A||B \rangle &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \{ \delta A^\dagger e^{\lambda H} \delta B e^{\lambda H} \} \\ &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda (\delta A | \bar{g} e^{\lambda \hat{H}} | \delta B) \end{aligned}$$

1) Für diese Beziehung ist die Hermiteizität des Liouvilleoperators notwendig!

ist die Konvergenz des Skalarprodukts durch die Dichtematrix gesichert. Wegen ihrer größeren Variabilität benutzen wir in dieser Arbeit die Spurmetrik anstelle der problemorientierten Mori-Wilcox-Metrik:

$$(A4.22) \quad \langle A \| B \rangle = \frac{1}{\beta} \chi_{AB}^T.$$

Deshalb tritt in unseren Formeln der statistische Operator $\mathfrak{g}$, der für die Konvergenz der Skalarprodukte sorgt, immer explizit auf, und wir stoßen bei den Laplacetransformierten der Korrelationsfunktionen auf Größen von der Struktur $\langle A | (z-L)^{-1} | B \rangle$. Unter der Voraussetzung, daß $\langle A | B \rangle^{-1}$ existiert, definieren wir den (nicht hermiteschen) idempotenten Operator:

$$(A4.23) \quad \mathfrak{P} = |B\rangle \cdot \langle A|B\rangle^{-1} \cdot \langle A|$$

und erhalten analog zu (A4.20):

$$(A4.24) \quad \boxed{\langle A | \frac{1}{z-L} | B \rangle = \frac{1}{z - \Omega - M(z)} \cdot \langle A | B \rangle}$$

mit

$$(A4.25a) \quad \Omega = \langle A | L | B \rangle \cdot \langle A | B \rangle^{-1},$$

$$(A4.25b) \quad M(z) = \langle A | L Q \frac{1}{z - Q L Q} Q L | B \rangle \cdot \langle A | B \rangle^{-1}$$

$$\text{und } Q = 1 - \mathfrak{P}.$$

A5. Fourierreihen für quasi-periodische Funktionen:

Eine Funktion $f(\xi)$ der komplexen Variablen ξ heißt quasi-periodisch, wenn sie die Gleichung

$$(A5.1) \quad f(\xi) = C f(\xi + p), \quad p \text{ komplexe "Periode",}$$

erfüllt. Geht man mit einem Fourierreihen-Ansatz

$$(A5.2) \quad f(\xi) = \frac{1}{p} \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} e^{-i z_{\nu} \xi} g(z_{\nu})$$

in (A5.1) ein, dann führt das auf folgende Bedingung für die Zahlen z_{ν} :

$$(A5.3) \quad z_{\nu} = \frac{1}{p} (\gamma + 2\pi\nu - i \ln|C|), \quad \text{wobei } C = |C| e^{i\delta}.$$

Für die Koeffizienten folgt durch Multiplikation von (A5.2) mit $e^{i z_{\nu} \xi}$ und Integration über ξ von ξ_0 bis $\xi_0 + p$ (längs der geraden Verbindungslinie):

$$(A5.4) \quad g(z_{\nu}) = \int_{\xi_0}^{\xi_0+p} d\xi e^{i z_{\nu} \xi} f(\xi) = p \int_0^1 d\alpha e^{i z_{\nu} p \alpha} f(\alpha p).$$

Im Falle des Green's Operators für imaginäre Zeiten (Kap. 5) ist

$$C = -\eta \rightarrow \ln|C| = 0; \gamma = \pi \frac{1+\eta}{2}; p = -i\beta \quad \text{und damit}$$

$$(A5.5) \quad z_{\nu} = \frac{1}{-i\beta} \left(2\nu + \frac{1+\eta}{2} \right) \pi = \begin{cases} \frac{\pi}{-i\beta} \cdot 2\nu & \text{für Bosonen} \\ \frac{\pi}{-i\beta} (2\nu+1) & \text{für Fermionen.} \end{cases}$$

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] PRIMAS, H.:
Helv. Phys. Acta 34, 331 (1961)
- FANO, U.:
"Liouville Representation of Quantum Mechanics",
in "Lectures of the Many-Body Problem", Caianiello (1964)
- ZWANZIG, R.:
Physica 30, 1109 (1964)
- Ben Reuven, A.:
Phys. Rev. 141, 34 (1966)
- [2] SAUERMAN, G.:
Physica 32, 2017 (1966)
- SCHWEGLER, H.:
phys. stat. sol. 41, 353 (1970)
- [3] GABRIEL, H.:
phys. stat. sol. 23, 195 (1967)
- GABRIEL, H., BOSSE, J. und RANDE, K.:
phys. stat. sol. 27, 301 (1968)
- GABRIEL, H.:
Phys. Rev. 181, 506 (1969)
- [4] GABRIEL, H., und BOSSE, J.:
"Angular Correlations Perturbed by ...",
in "Angular Correlations in Nuclear Disintegration",
eds. H. van Krugten and B. van Nooijen (Rotterdam University Press,
The Netherlands, 1971) p. 394
- [5] WEIDLICH, W.:
Z. Physik 248, 234 (1971)
- [6] DES CLOIZEAUX, J.:
"Linear Response, Generalized Susceptibility and Dispersion Theory",
in "Theory of Condensed Matter" (Proceedings Series), International
Atomic Energy Agency (Vienna, 1968) p. 325
- [7] KADANOFF, L.P. und BAYM, G.:
"Quantum Statistical Mechanics",
in "Frontiers in Physics" (1962)

- [8] FEITER, A.L. und WALECKA, J.D.:
"Quantum Theory of Many-Particle Systems", McGraw-Hill, Inc.,
New York (1971)
- [9] MORI, H.:
Progr. Theor. Phys. 33, 423 (1965)
- [10] KAWASAKI, K.:
Progr. Theor. Phys. 39, 1133 (1968)
- [11] MORI, H.:
Progr. Theor. Phys. 34, 399 (1965)
- [12] BOGOLIUBOV, N.N.:
"Lectures on Quantum Statistics" 2, engl. ed. L. Klein and
and S. Glass (Macdonald Technical and Scientific, London, 1971)
- [13] LÜDERS, G.:
"The Influence of Impurities and Boundary Effects on Transitions
in Superconductivity",
in "Quantum Fluids", eds. Nathan Wiser and D.J. Amit (Gordon and
Breach Science Publishers, 1970) p. 401
- [14] EMERY, V.J.:
"Superfluidity of Liquid He^3 ",
in "Quantum Fluids", eds. Nathan Wiser and D.J. Amit (Gordon and
Breach Science Publishers, 1970) p. 333
- [15] EVANS, W.A.B. und IMRY, Y.:
Nuovo Cimento 63, 155 (1969)
- [16] IMRY, Y.:
"Self-consistent Pairing Theory of the Bose Superfluid",
in "Quantum Fluids", eds. Nathan Wiser and D.J. Amit (Gordon and
Breach Science Publishers, 1970) p. 603
- [17] SHIMIZU, T.:
J. Phys. Soc. of Japan 28 (4), 827 (1969)
- [18] SHIMIZU, T.:
J. Phys. Soc. of Japan 30 (5), 1292 (1970)
- [19] MORITA, T., HORIGUCHI, T. und KATSUAR, S.:
J. Phys. Soc. of Japan 29 (1), 84 (1970)

- [20] TJABLIKOW, S.W.:
"Quantentheoretische Methoden des Magnetismus",
(B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Leipzig, 1968)
- [21] ESSAM, J.W. und GARELICK, H.:
J. Phys.C (Solid State Physics) 2 (2), 317 (1969)
- [22] MATTIS, D.C.:
"The Theory of Magnetism",
(Harper & Row, N.Y., 1965)
- [23] THOMAS, H.:
"Phase Transitions and Critical Phenomena",
in "Theory of Condensed Matter" (Proceedings Series), International
Atomic Energy Agency (Vienna, 1968) p. 357
- [24] BOSSE, J.:
"Gemeinsame Ausgangsformel für Mößbauer-Effekt und Winkel-
korrelation",
in "Arbeitsbericht des Fachbereichs Physik der FU Berlin 1970/71"
- [25] BOSSE, J.:
Diplomarbeit (Braunschweig 1969), unveröffentlicht
- [26] BOSSE, J.:
Z. Physik 251, 30 (1972)
- [27] GANIMACHER, F.R.:
"Matrizenrechnung I",
(VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1958)
- [28] SCHWEGLER, H.:
"Theorie der temperaturabhängigen Linienform von Mößbauer-Hyper-
feinspektren paramagnetischer und magnetisch geordneter Phasen"
(private Mitteilung)

Diese Arbeit wurde im I/IV. Physikalischen Institut der Freien Universität Berlin in den Jahren 1969 bis 1972 angefertigt.

Herr Professor Dr. H. Gabriel gab die Anregung zu der Arbeit.

Für seine Anteilnahme und die zahlreichen wertvollen Diskussionsbeiträge möchte ich ihm herzlich danken.

LEBENS LAUF

Am 6. August 1943 wurde ich als Sohn des Bauingenieurs Gerhard Bosse und seiner Ehefrau Elfriede, geb. Klug, in Gleidingen bei Hannover geboren.

Von April 1950 bis 1954 besuchte ich die Volksschule in Hannover. Anschließend besuchte ich das Humboldt-Gymnasium in Hannover und vom Sommer 1957 an die Hoffmann-von-Fallersleben-Schule in Braunschweig, wo ich im Februar 1963 die Reifeprüfung ablegte. Im Sommer 1959 reiste ich für ein Jahr als Austauschschüler nach Seattle, Washington, USA.

Im Sommersemester 1963 begann ich das Physikstudium an der Technischen Universität Braunschweig. Die Diplom-Vorprüfung bestand ich im November 1965. Ab Herbst 1967 fertigte ich unter der Leitung von Herrn Dr. H. Gabriel im Institut für Theoretische Physik A der TU Braunschweig meine Diplomarbeit: "Liouville-Darstellung der Theorie der Spin-Gitter-Relaxation" an. Die Diplomprüfung bestand ich im Mai 1969. Seit Juni 1969 bin ich als wissenschaftlicher Assistent am I/IV. Physikalischen Institut der Freien Universität Berlin tätig.

Berlin, im Juni 1972

